



# VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

## FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ

FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING

## ENERGETICKÝ ÚSTAV

ENERGY INSTITUTE

## POKROČILÉ VÝPOČTOVÉ METODY SPALOVÁNÍ TUHÝCH PALIV

ADVANCED COMPUTATIONAL METHODS FOR COMBUSTION OF SOLID FUELS

### DIPLOMOVÁ PRÁCE

MASTER'S THESIS

### AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Bc. Jiří Strouhal

### VEDOUCÍ PRÁCE

SUPERVISOR

Ing. Tomáš Juřena, Ph.D.

BRNO 2019



# Zadání diplomové práce

Ústav: Energetický ústav  
Student: **Bc. Jiří Strouhal**  
Studijní program: Strojní inženýrství  
Studijní obor: Energetické inženýrství  
Vedoucí práce: **Ing. Tomáš Juřena, Ph.D.**  
Akademický rok: 2019/20

Ředitel ústavu Vám v souladu se zákonem č.111/1998 o vysokých školách a se Studijním a zkušebním řádem VUT v Brně určuje následující téma diplomové práce:

## Pokročilé výpočtové metody spalování tuhých paliv

### Stručná charakteristika problematiky úkolu:

Pro detailní analýzu spalování v kotlech se s výhodou nasazují metody výpočtové dynamiky tekutin (tzv. CFD), které umožňují modelovat turbulentní proudění, přenos tepla, průběh chemických reakcí a případně další jevy jako např. zanášení teplosměnných ploch. Klíčovou součástí modelů roštových kotlů je model spalované vrstvy paliva, v níž probíhá řada dějů, které je zapotřebí vhodně popsat. Zároveň by takový model měl být schopen zohlednit interakci mezi vrstvou a kotlem. Práce se zaměří na implementaci modelu hořící vrstvy do modelu roštového kotle pomocí nástrojů dostupných v software ANSYS Fluent.

### Cíle diplomové práce:

- 1) Zpracovat stručnou rešerši o metodách CFD modelování roštového spalování.
- 2) Popsat model termické přeměny tuhých paliv včetně jeho předpokladů a omezení.
- 3) Provést bilanci spalovací komory pro dané palivo a provozní podmínky.
- 4) Pomocí uživatelských funkcí implementovat model vrstvy paliva a integrovat jej do modelu spalovací komory v systému ANSYS Fluent.
- 5) Demonstrovat metodu v simulaci roštového spalování tuhých paliv a interpretovat výsledky.
- 6) Provést diskusi o možnostech praktického nasazení a rozšíření modelu vzhledem k stanoveným předpokladům, omezením a potřebným vstupním parametrům modelu.

### Seznam doporučené literatury:

GÓMEZ, M.A., PORTEIRO, J., PATINO, D., MÍGUEZ, J.L. CFD modelling of thermal conversion and packed bed compaction in biomass combustion. Fuel 117 (2014), 716–732.

MILKJOVIĆ, B., PEŠENJANSKI, I., VIĆEVIĆ, M. Mathematical modelling of straw combustion in a moving bed combustor: A two dimensional approach. Fuel 104 (2013), 351-364.

ANSYS® Academic Research, Release 18.1, Help System, Fluent Theory Guide. ANSYS, Inc.

Termín odevzdání diplomové práce je stanoven časovým plánem akademického roku 2019/20

V Brně, dne

L. S.

---

doc. Ing. Jiří Pospíšil, Ph.D.  
ředitel ústavu

---

doc. Ing. Jaroslav Katolický, Ph.D.  
děkan fakulty

## **ABSTRAKT**

Cílem této práce bylo vytvořit na základě dostupných teoretických poznatků model termické přeměny tuhého paliva. Toho je dosaženo za pomoci standartních nástrojů obsažených v softwaru ANSYS Fluent v kombinaci s uživatelsky definovanými funkcemi. V úvodu práce jsou nejprve stručně shrnuty základní přístupy k CFD modelování spalování tuhých paliv. Následuje sestavení matematického modelu a dílčích algoritmů výpočtu. Části modelu a model jako celek jsou otestovány na jednoduchých příkladech a následně na modelu experimentálního reaktoru pro analýzu spalování biomasy.

### **Klíčová slova**

výpočtová dynamika tekutin, roštové spalování, spalování biomasy, model sypaného lože, sušení paliva, spalování slámy

## **ABSTRACT**

The aim of this thesis was to create a model of thermal conversion of solid fuel. This is achieved by means of standard modelling tools included in software ANSYS Fluent in combination with user-defined functions (UDF). In first part of thesis basic approaches to CFD modelling of solid fuel combustion are presented. Building of a mathematical model and corresponding algorithms follows. Individual parts of a created model and its parts are tested on simple physical cases and then on case of experimental reactor for analysing biomass combustion.

### **Keywords**

computational fluid dynamics, grate firing, biomass firing, packed bed model, fuel drying, straw combustion

## BIBLIOGRAFICKÁ CITACE

STROUHAL, Jiří. *Pokročilé výpočtové metody spalování tuhých paliv*. Brno, 2019. Dostupné také z: <https://www.vutbr.cz/studenti/zav-prace/detail/113178>. Diplomová práce. Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, Energetický ústav. Vedoucí práce Tomáš Juřena.

## PROHLÁŠENÍ

Prohlašuji, že jsem *diplomovou práci* na téma **Pokročilé výpočtové metody spalování tuhých paliv** vypracoval(a) samostatně s použitím odborné literatury a pramenů, uvedených v seznamu, který tvoří přílohu této práce.

---

Datum

---

Jméno a příjmení

## **PODĚKOVÁNÍ**

V prvé řadě bych zde rád poděkoval vedoucímu své diplomové práce Ing. Tomáši Juřenovi, Ph.D. za veškerou odborně-pedagogickou pomoc, cenné rady a velmi ochotný přístup po celou dobu tvorby této práce.

Velké poděkování náleží mým blízkým a hlavně mojí rodině, která mě podporovala po celou dobu studia nejen na vysoké škole. Poslední část poděkování chci věnovat své přítelkyni Hance za její podporu a nesmírnou trpělivost.



## OBSAH

Úvod.....	11
1 CFD modelování roštového spalování tuhých paliv .....	12
1.1 Všeobecné charakteristiky roštového spalování biomasy .....	12
1.2 CFD modelování roštového spalování biomasy .....	12
1.2.1 Empirické modely .....	13
1.2.2 Model kontinua .....	14
1.2.3 Částicový model.....	14
1.3 Oddělené modely lože a volného objemu.....	14
1.4 Přístupy k modelování hlavních dějů při roštovém spalování.....	15
1.4.1 Sušení .....	15
1.4.2 Pyrolýza.....	15
1.4.3 Kolaps palivové vrstvy.....	15
1.5 Příklady modelů termické přeměny tuhých paliv .....	16
1.5.1 FLIC .....	17
1.5.2 BASIC .....	17
1.5.3 GRATECAL.....	17
2 Model experimentálního reaktoru.....	19
2.1 Řešený příklad reaktoru.....	19
2.2 Model zařízení a paliva .....	20
2.2.1 Tvorba výpočetní sítě .....	20
2.2.2 Palivo.....	22
2.3 Vlastnosti plynné směsi .....	25
2.4 Bilance spalovací komory.....	26
2.5 Stanovení okrajových podmínek.....	27
3 Tvorba fyzikálního modelu.....	29
3.1 Dílčí modely.....	29
3.1.1 Hoření směsi plynů .....	30
3.1.2 Spalování tuhé hořlaviny.....	31
3.1.3 Sušení paliva.....	32
3.1.4 Přenos a zdroje tepla .....	33
3.1.5 Radiační model .....	35
3.1.6 Odpor porézního média.....	37
3.2 Implementace modelu v prostředí ANSYS Fluent.....	38
3.2.1 Inicializace.....	39
3.2.2 Vlastnosti složek tuhé fáze .....	39

3.2.3	Linearizace zdrojových členů .....	40
3.2.4	Bilanční kontrola.....	40
3.2.5	Obecné poznámky k výpočtům veličin .....	41
3.3	Test funkčnosti knihovny .....	42
3.4	Demonstrace modelu reaktoru na hrubé síti .....	45
	Závěr práce .....	51
	Seznam použitých zdrojů .....	52
	Seznam použitých symbolů a zkratek.....	54
	Seznam použitých obrázků a tabulek.....	56
	Seznam příloh .....	57

## **Úvod**

Ve své diplomové práci se budu zabývat vývojem modelu hořící vrstvy tuhého paliva na pevném roštu. Mou snahou bude vniknout do problematiky řešené značným množstvím pracovišť po celém světě. Doposud získané poznatky všech těchto skupin i jednotlivců poslouží jako zdroj informací pro dosažení cíle práce. Dnes existuje řada komerčních SW balíčků umožňujících řešení celé škály různých fyzikálních a chemických dějů, které se spalováním bezprostředně souvisí. Nicméně pro specifitější aplikace, jako například pro spalování tuhého komunálního odpadu, případně pro velice detailní poznání procesů v energetice tuhých paliv, je často nutné doposud známé a ozkoušené výpočetní nástroje dále rozšířit.

Hlavní náplní mé práce bude výběr vhodných modelů k popisu dějů pro daný příklad spalování. Konkrétně bylo zvoleno spalování biomasy v malém experimentálním reaktoru. Ten poslouží jako vzor pro geometrii sítě, na které bude možné experimentovat se správným nastavením a kombinací dílčích fyzikálních modelů. Do uvažovaných jevů se řadí turbulentní proudění, transport složek plynné směsi, hoření tuhých i plynných složek, termický rozklad hmoty paliva, fázové přeměny látek a všechny způsoby přenosu tepla. Pro implementaci jednotlivých modelů bude využit ANSYS Fluent, nabízející dostatečně robustní metody řešení, řadu potřebných fyzikálních modelů a hlavně možnost rozšíření pomocí uživatelsky definovaných funkcí. K tomu je nutná alespoň základní znalost programovacího jazyka C.

Výstupem mé práce bude soubor výpočetních nástrojů sloužících jako podpora standartních funkcí existujícího SW Fluent pro účely možného využití pro praktické aplikace v oblasti spalování tuhých paliv.

## 1 CFD modelování roštového spalování tuhých paliv

V následující kapitole se pokusím uvést rozdělení a aplikace přístupů k CFD modelování spalování tuhých paliv s bližším zaměřením na rostlinnou biomasu (ta bude posléze použita i v praktické části práce jako palivo pro testovací simulaci). Aplikace jednotlivých přístupů k modelování se pokusím demonstrovat uvedením několika příkladů prací jiných autorů včetně úspěšnosti nasazení konkrétních modelů a jejich dalšího případného rozšiřování a perspektivy využití.

### 1.1 Všeobecné charakteristiky roštového spalování biomasy

Roštové spalování je nejstarším typem průmyslové technologie pro energetické využívání tuhých paliv. Rozsahy výkonů se pohybují v případě výroby tepla od 25 kW<sub>t</sub> do 150 MW<sub>t</sub> [1], pro kogeneraci pak [2] uvádí výkony 4–300 MW<sub>e</sub>. Roštové spalování nachází v současnosti své uplatnění zejména při spalování biomasy, případně komunálních a průmyslových odpadů. Rošt jakožto prvek energetického zařízení plní následující funkce [1]:

- Podpírá vrstvu paliva a zajišťuje její pohyb ohništěm a její případně promíchávání. Z toho plyne jeho celkový vliv na správnost a úplnost průběhu všech fází spalování.
- Podílí se na distribuci primárního vzduchu – správný návrh roštu je tak součástí optimalizace spalovacího procesu z hlediska přívodu spalovacího vzduchu.
- Zajišťuje odvod tuhých zbytků z ohniště.
- Poskytuje možnost regulace výkonu kotle.

Významným důvodem pro využívání biomasy je její charakter obnovitelného zdroje a CO<sub>2</sub> neutralita. Uhlík uvolněný spalováním pochází ze současných rostlin a tedy současné biosféry, kterou je opět posléze prostřednictvím rostlin vázán a opět uložen v energeticky využitelné formě. Tento cyklus přitom trvá relativně krátkou dobu (jednotky až desítky let). Kdybychom uvažovali koloběh uhlíku i v případě fosilních paliv, byl by mnohonásobně delší (alespoň miliony let). Při spalování biomasy je pak třeba počítat s některými jejími typickými vlastnostmi:

- větší odchylky složení napříč jednou dávkou paliva
- vyšší obsah prchavé hořlaviny než u druhého paliva často používaného v roštových zařízeních (uhlí) a naopak typicky nižší obsah popelovin
- nižší obsah síry a naopak vyšší podíl chloru a alkálií
- nízká teplota měknutí popelovin

Kotle jsou následně navrhovány s ohledem na uvedené vlastnosti. V případě bylinné biomasy a stébelnin je nutné počítat s vysokým podílem prchavých složek hořlaviny a dle toho upravit geometrii zařízení tak, aby bylo umožněno dostatečné vyhoření produkovaných spalitelných složek v plynné směsi uvolňované z vrstvy paliva.

### 1.2 CFD modelování roštového spalování biomasy

Po nastínění významu spalování biomasy následuje obeznámení se s možnostmi

zlepšování technologií pro spalování a znalostí o procesech se spalováním spojených. K tomu patří znalost jak chování spalovacích zařízení, tak průběh spalování použitého paliva v závislosti od jeho charakteristik. K tomu významně napomáhají zkušební reaktory dostatečně uzpůsobené k detailnímu měření veličin souvisejících s procesem hoření zkoumaného vzorku paliva, což může být v případě průmyslových zařízení velmi náročné až nemožné. Vedle experimentálního výzkumu však lze využít dále možnosti CFD analýzy pro detailní zobrazení potřebných veličin, jež nemusí být dostupné ani v malých experimentálních zařízeních přímo uzpůsobených k měření, tím spíše pak v reálných průmyslových zařízeních.

U spalování biomasy je tvorba CFD modelu poněkud ztížena větší komplexností spalovacího procesu, zahrnujícího sušení, devolatilizaci a hoření tuhé hořlaviny. Spalování probíhá jak v palivovém loži, tak i nad ním, přičemž obě prostředí spolu vzájemně komunikují prostřednictvím výměny látek a energie. Vlastnosti biomasy (Tab. 1.1) mohou navíc značně kolísat. Pro stejné palivo o vysokém obsahu vlhkosti (např. 50 % pro čerstvě sklizené rostliny) může být doba spalování několikanásobná oproti situaci, kdybychom jej předsoušeli (vlhkost v jednotkách %). Obsah prchavé hořlaviny je pak výrazně vyšší než v případě jiných tuhých paliv jako například uhlí. Výhřevnosti dřevní a bylinné biomasy uvádí [3].

Prchavá hořlavina	Tuhá hořlavina	Vlhkost	Popelovina
65–85 % hm.	7–20 % hm.	5–50 % hm.	0.5–20 % hm.

Tab. 1.1 – Rozsahy % hm. pro hrubý rozbor biomasy [4]

Přehled jednotlivých aplikací CFD uvádějí autoři přehledového článku [2] prostřednictvím odkazů na modely řady jiných autorů. Tyto jsou rozděleny do 5 skupin podle bližšího zaměření podle okruhu jevů, na který je daný model zaměřen:

- 1) konverze biomasy v palivovém loži na roštu
- 2) mísení a spalování nad palivovým ložem
- 3) vznik a emise  $\text{NO}_x$  u roštových kotlů na biomasu
- 4) zanášení
- 5) dávkové spalování

### 1.2.1 Empirické modely

Základním rysem je zadání výstupu látek a energie z palivového lože pouze jako okrajové podmínky pro následný výpočet dějů ve volném objemu nad ložem. Lože samotné je rozděleno na daný počet úseků podle typu probíhajících dějů (na pohyblivých roštech typicky podle hlavních fází, tj. sušení, odplyňování, hoření tuhé fáze a dohořívání tuhých zbytků). Pro každou fázi je na základě průmyslové praxe a provozních dat odhadnuta rychlost probíhajících dějů a následně pak proveden výpočet bilance hmotnosti, hybnosti a energie. Odtud již dokážeme získat odpovídající profily teploty, rychlostí proudu plynů a koncentrací složek, neboť dostatečně jemné proměření profilů těchto veličin je v praxi obtížné až nemožné. Tím získáme okrajové podmínky pro vstup do volného objemu nad ložem, kde jsme již schopni pomocí známých CFD nástrojů řešit problém dějů probíhajících samostatně v plynné fázi. To nám může posloužit k navržení ohniště ve volné části nad ložem (například rozmístění a množství sekundárního spalovacího vzduchu).

Výhodou je přímá experimentální souvislost s danou aplikací, naopak z toho plynoucí nevýhodou je závislost na konkrétních provozních podmínkách a tedy jen omezená nebo žádná přenositelnost získaných poznatků na jiná zařízení a paliva. Oproti dalším modelům, zahrnujícím i výpočty dějů přímo uvnitř palivového lože, jsou zejména nižší nároky na technickou náročnost fyzikálních modelů a na výpočetní techniku. Rovněž okrajové podmínky (informace o zmíněných profilech teploty, složení aj.) jsou z definice již experimentálně potvrzeny.

### 1.2.2 Model kontinua

Tuhá fáze je zde uvažována v podobě spojitého média, jehož vlastnosti vzniknou prostorovým průměrováním vlastností původních částic (tj. hmota částice přítomná v elementárním objemu se uvažuje jako rovnoměrně rozložená po tomto objemu) a přiřazenou hodnotou porozity, která se obecně mění s časem a polohou. Transportní rovnice pro hmotu, složky plynné/tuhé směsi, hybnost a energii jsou řešeny pro obě fáze samostatně, přičemž tyto 2 skupiny rovnic jsou pak vzájemně provázány v příslušných členech transportních rovnic. Pro každou z fází jsou pak dále zadány rychlosti probíhajících reakcí a odpovídající výměna hmoty s druhou fází. Model porézní zóny je součástí moderních komerčních CFD balíčků, ačkoli má některá omezení, které je uživatel nucen doplnit o externí funkce. Heterogenní reakce, radiační přenos tepla apod. je pak v rámci možností daného SW nutné definovat zmíněnými externími funkcemi, což bude popsáno v dalších částí práce zabývající vlastní implementací jednoduchého modelu palivového lože. Model porézní zóny je využit např. v pracích [5], [6], [7] a [8].

### 1.2.3 Částicový model

Popis tuhé fáze je realizován za pomoci metody diskrétních prvků (Discrete Element Method – DEM). Hmotu paliva uvažujeme v podobě jednotlivých tuhých částic, u nichž je řešen jejich translační i rotační pohyb, změna velikosti a geometrie, složení, teploty a dalších veličin. Oproti modelům kontinua, kde je často pohyb hmoty tuhé fáze buďto zcela zanedbán nebo jsou řešeny jen vybrané směry pohybu, zatímco pro ostatní směry je zadány fixní rychlost (pohyb roštu apod.), diskrétní model umožňuje lepší přístup ke stanovení pohybu a mísení hmoty paliva [9].

Úspěšné použití DEM pro simulaci spalování v experimentálním reaktoru a následné parametrické studii popisuje [10]. Parametrickou studii pomocí DEM sušení biomasy na vibračním roštu provedli autoři [11], pro 1D model pyrolýzy biomasy přístup použil [12].

## 1.3 Oddělené modely lože a volného objemu

Přístup umožňuje použití různé modelovací techniky pro palivové lože a pro volný objem, které jsou poté propojeny pomocí sdílených okrajových podmínek na rozhraní obou zón. Typický model lože poskytuje okrajové podmínky, jako jsou rychlost, teplota, složení apod. pro spalování a děje ve volném objemu. Opačným směrem pak předpovídané děje ve volném objemu poskytují okrajovou podmínku pro záření dopadající zpět na povrch lože.

Uvedené schéma používá např. [4] pro nestacionární 1D model spalování odpadu. Dalším příkladem může být nestacionární 3D model uvedený v [8]. Autoři kombinují 2 modely – pro řešení dějů ve volném objemu nad ložem využívají Fluent jakožto dostatečně robustní

nástroj pro simulace dějů v plynné směsi, zatímco pro samotné lože využívají dále zmíněný FLIC [13]. Stejnou kombinaci úspěšně použili autoři [14] pro simulaci spalování tuhých komunálních odpad. Podobným způsobem [7] kombinuje samostatný model palivového lože GRATECAL a model volného objemu, pro který byl opět využit Fluent.

Na rozdíl od empirického přístupu zmíněného výše již zde máme k dispozici informaci o průběhu dějů uvnitř lože, které jsme předtím pouze odhadovali na základě rozložení základních procesů v loži, hmotnostní a tepelné bilance. Navíc v případě, že již máme dostatečné informace o dějích v loži nebo volném objemu (opět empirický přístup, viz výše), můžeme oba modely opět oddělit a řešit již případ zbývající zóny. To může být výhodné i pro testování a validaci modelu této zbývající zóny.

## 1.4 Přístupy k modelování hlavních dějů při roštovém spalování

### 1.4.1 Sušení

Práce [15] uvádí následující 3 přístupy.

- *Heat sink model.* Předpokladem je sušení při konstantní teplotě varu, tudíž i veškeré dodané teplo je v průběhu sušení předáno do vznikající páry. Přestup hmoty i tepla probíhá okamžitě a rychlost sušení je tak limitována jen dodáváním tepla.
- *Kinetický model prvního řádu.* Opět předpokládá okamžitý přestup hmoty a tepla mezi plynem a palivem. Rychlost sušení závisí na teplotě a koncentraci vody v daném objemu. Nepočítá s nasyceným stavem okolní plynné směsi.
- *Rovnovážný model.* Tento přístup předpokládá rovnovážný stav mezi kapalinou a parou na povrchu částic paliva. Rychlost odpařování je pak dána jak rozdílem koncentrace v nasyceném stavu a plynné směsi, tak i součinitelem přestupu hmoty a měrným povrchem paliva, viz kap. 3.1.3.

### 1.4.2 Pyrolýza

Jakmile skončí fáze sušení paliva a teplota dále roste, nastává postupný termický rozklad složek hmoty paliva, přičemž uvnitř částic probíhá bez přístupu kyslíku – právě tento proces se nazývá pyrolýza. Podle složitosti procesu, resp. počtu a uspořádání uvažovaných reakcí lze vyčlenit 3 skupiny modelů pyrolýzy [16].

- jednostupňové,
- s paralelními reakcemi,
- vícestupňové (následné reakce a rozklad dehtu – sekundární pyrolýza [17]).

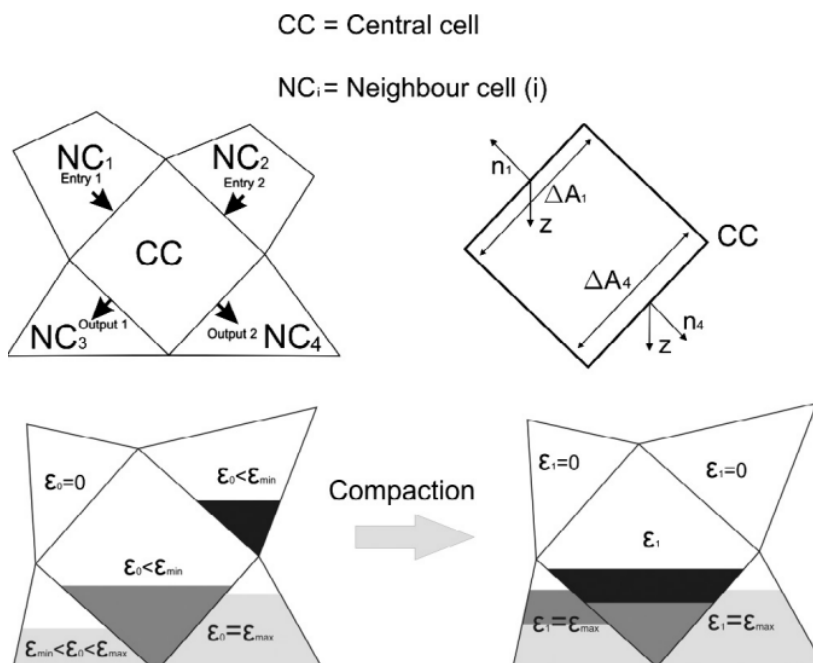
### 1.4.3 Kolaps palivové vrstvy

Na základě výsledků ze spalování slámy v experimentálním reaktoru uvádí [6], že v průběhu ani jedné z fází spalování nedošlo k výrazné změně objemu palivového lože a v souvisejícím výpočtním modelu v též práci tento poznatek aplikuje. Konstantní objem lože předpokládají ve svých modelech i [6], [18] a [19].

V práci [20] autoři popisují úspěšné použití modelu porézní zóny pro nestacionární případ roštového spalování jednosložkového paliva (dřevěného uhlí), zahrnující kombinaci změny

objemu i porozity palivového lože. Autoři zvolili vícedimenzionální (2D) model kvůli možnosti zachycení důležitých jevů spojených s úbytkem hmoty paliva jako je klenbování (*arching*) a tvorby kanálů (*channeling*). Na počátku je stanovena porozita palivového lože, ve které autoři uvažují nehomogenity vznikající během přikládání paliva. Podle video záběrů zmíněných v článku [20] dochází během spalování vždy k pozvolnému lokálnímu narůstání porozity lože, zatímco lokální kolaps hmoty paliva probíhá skokově. Ke kolapsu dochází při podkročení kritické hodnoty porozity. Po ní dojde ke skokové změně na hodnotu, kterou autoři položili rovnu počáteční, resp. průměrné počáteční porozitě. Úbytek objemu paliva je realizován prostřednictvím zmenšení objemu dané buňky sítě a jejím přesunem ve směru tíhového zrychlení. Předpoklad pohybu pouze vertikálním směrem autoři dokládají experimentem se spalováním dřevěných peletek ve skleněné trubici, kdy v horizontálním směru pouze smršťování částic, nikoli však jejich transport.

Na rozdíl od předchozího případu autoři [21] popsali zmenšování objemu lože pomocí transportu hmoty tuhé fáze mezi sousedícími buňkami. Navíc oproti předchozímu případu uvažují vícesložkové palivo. Algoritmus výpočtu transportu mezi sousedícími buňkami probíhá následovně: vždy na konci časového kroku program pro danou buňku sítě, zvanou centrální, provede cyklus přes sousedící buňky (Obr. 1.1). Pro každou z nich program stanoví transportovaný objem tuhé fáze jako minimum ze dvojice hodnot: maximálního možného objemu, který je přijímající buňka schopna pojmout, a objemu tuhé fáze v kolabující („dárcovské“) buňce. Tento objem je pak normován poměrem daného objemového toku z/do centrální buňky k celkovému toku z/do centrální buňky.



Obr. 1.1 – Schéma realizace procesu kolapsu lože [22]

## 1.5 Příklady modelů termické přeměny tuhých paliv

Ačkoli v předchozí kapitole byly již některé konkrétní práce uvedeny, bude tyto a některé další vhodné popsat podrobněji. V tomto ohledu za zmínku stojí přehledový článek [2].



### 1.5.1 FLIC

Pro účely detailního modelu spalování tuhých komunálních odpadů vznikla práce [13] zabývající se vývojem nestacionárního 2D modelu spalování v pevném loži. Účelem bylo popsat jednak průběh všech 4 základních fází hoření, dále pak i pohyby hmoty v palivové vrstvě, tvorby kanálů (*channeling*), časové změny složení přikládaného paliva apod.

### 1.5.2 BASIC

Snahou autorů práce [22] bylo vytvořit nový samostatný model hořící palivové vrstvy, jež měl být další krok v rozvoji skupiny modelů, ke které se řadí i FLIC [13]. Z hlediska praktické aplikace se autoři zaměřili na spalování tuhého komunálního odpadu. Výsledkem byl model nazvaný *BASIC* (*Bulk Accumulated Solids Incineration Code*). Jak autoři uvádí, k dílčím cílům patřilo odstranění některých předpokladů předchozích modelů, z nichž vyjmenovali následující:

- Gradienty rychlosti, teploty a koncentrací složek na rozhraní lože a volného objemu byly ve zmíněných starších pracích pokládány rovno nule.
- Zmiňování předchozí autoři uvažovali pouze 3 reagující složky plynné fáze, tj. CO, H<sub>2</sub> a obecnou sloučeninu C<sub>x</sub>H<sub>y</sub>O<sub>z</sub>.
- Předchozí práce neobsahovaly dostatečně přesné stanovení složení produktů pyrolýzy, odpovídající prvkovému a hrubému rozboru spalovaného odpadu.

K hlavním předpokladům tohoto modelu patří konstantní hodnota porozity v průběhu celého procesu. Úbytek hmoty paliva se tedy projevuje pouze zmenšováním objemu lože. Dalším předpokladem je lokální tepelná rovnováha mezi palivem a plynnou směsí. Transport tuhé fáze je řešen pouze v horizontálním směru jako důsledek pohybu roštu.

Pro implementaci modelu autoři využili prostředí MATLAB. Pro validaci posloužil experiment se spalováním zkušební dávky směsi kartonu a zbytků zeleniny v konstantním poměru. Následný souhlas numerické predikce s výsledky experimentu byl vyhodnocen jako velice dobrý. Dále autoři provedli parametrickou studii vlivu velikosti částic a tlaku spalovacího vzduchu na průběh spalovacího procesu. Vliv tlaku byl zkoumán mimo jiné pro účely návrhu spalovacích zařízení pro oblast Tibetu.

### 1.5.3 GRATECAL

K pracím vytvořeným na ÚPI se řadí práce [7] vytvořená pro účely vývoje samostatného modelu spalování v pevném loži, se zaměřením zejména na biomasu a tuhé komunální odpady. Pro popis tuhé fáze autor použil model porézní zóny se zanedbáním detailních procesů v rámci jednotlivých částic. Zahrnuje všechny základní procesy probíhající v loži, jejichž fyzikální modely byly experimentálně ověřovány v práci [6]. K hlavním předpokladům modelu patří následující:

- Směs spalovacího média a produktů pyrolýzy je tvořena O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> a obecnou sloučeninou zastupující ostatní produkty pyrolýzy C<sub>x</sub>H<sub>y</sub>O<sub>z</sub>. Všechny složky jsou uvažovány jako nestlačitelné ideální plyny.
- Radiační přenos tepla v loži je řešen pomocí modifikace efektivní tepelné vodivosti.

- Tlaková ztráta napříč ložem je zanedbatelná.

Výsledkem první části [7] je nestacionární 1D model porézní zóny pro simulaci spalování v experimentálním reaktoru, tvořeném válcem s dokonale izolovanými stěnami. Všechny procesy se přitom odehrávají převážně ve směru osy reaktoru. V další části je pak vyvíjen stacionární 2D model hořící vrstvy pro praktické nasazení v průmyslových spalovacích zařízeních. Podobně jako v práci [22] autor uvažuje pouze horizontální pohyb hmoty paliva v důsledku pohybu roštu. Vyvinutý model porézní zóny autor pod názvem GRATECAL implementoval prostřednictvím prostředí MATLAB, včetně vývoje grafického uživatelského rozhraní. Následně byl model převeden jazyka C a pomocí uživatelsky definovaných funkcí (User-Defined Functions – UDF) propojen s prostředím Fluent.

Důraz při testování modelu autor kladl na jeho konzervativnost, kdy zkoumaným kritériem byla relativní hodnota nerovnováhy. Jako přípustnou hodnotu nerovnováhy pro energii autor uvedl 0.01 % vstupního tepelného toku. Tuto se podařilo zajistit hodnotou škálovaných reziduí (použitých jako kritéria konvergence) menší než  $10^{-6}$ .

## 2 Model experimentálního reaktoru

Ačkoli pro průmyslovou praxi je důležité aplikovat matematický model spíše na větší zařízení, vývoj modelu v této práci bude prováděn dle příkladu laboratorních reaktorů s pevným roštem. Návrh geometrie a okrajových podmínek je díky tomu jednodušší a je možné se tak více soustředit na zachycení samotných dějů v palivovém loži. Předlohou pro model spalování vrstvy paliva na roštu je experimentální zařízení vybavené pevným roštem, na který je přiložena (případně promíchána a upěchována) vrstva paliva o známých vlastnostech. Dále je spalovací komora uzavřena, přičemž je vrstva ponechána bez zásahu po celou dobu zapalování a hoření. Testovací reaktory mohou být vybaveny dohořivací komorou, tato však není důležitá pro samotné děje na roštu (nedochází ke zpětnému ovlivnění dějů ve spalovací komoře). V celkové bilanci proto budeme dále uvažovat pouze přiložené palivo, primární vzduch a odvod spalin. Pro model pak budou důležitá podrošťová část (distribuce spalovacího vzduchu), palivové lože, volná část komory nad ložem a část spalinovodu.

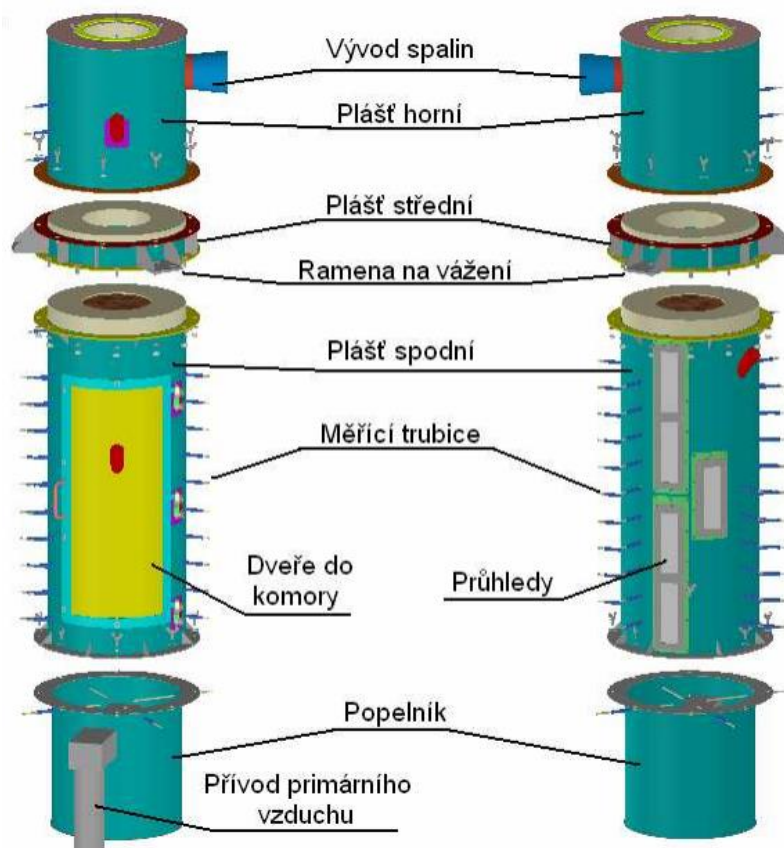
### 2.1 Řešený příklad reaktoru

Jako konkrétní příklad nám poslouží experimentální reaktor navržený v [23], poskytující dostatečné informace o konstrukci spalovací komory, použitých materiálech, přívodu spalovacího vzduchu apod. Spalovací komora (*Obr. 2.1*) je v tomto případě tvořena válcovou nádobou rozdělenou roštem na 2 části. Přívod vzduchu je jediný a je umístěn v podrošťové části ve stěně komory. Vzduch je možné před vstupem do podrošťové části předehřívat na 200 – 250°C. Odvod spalin v nadrošťové části je opět realizován pomocí jediného kanálu ústícího ve stěně komory.

Zapalování vrstvy paliva je v případě navrženého reaktoru dosaženo pomocí několika plynových hořáků. Pro účel této práce lze však uvažovat způsob zapalování pomocí topné spirály umístěné v horní podstavě komory. Tak odpadá nutnost brát v úvahu děje v plamenu hořáku. Po tomto zvážení důležitých prvků spalovací komory můžeme vytvořit jednoduchou geometrii vnitřního objemu komory, která se skládá pouze z hlavní válcové části, krátkého úseku spalovacího vzduchu a spalinovodu. Ostatní tvarové a konstrukční prvky zanedbáváme včetně roštu, který budeme později řešit pouze jako tlakovou ztrátu při průchodu médiem 2D plochou, která bude rošt zastupovat (opět snižujeme nároky na výpočetní výkon).

Tento postup odvození by byl podobný i pro jiná zařízení za předpokladu, že využijeme pouze radiačního ohřevu paliva, kdy jediný vstup hmoty do kontrolního objemu reprezentuje primární vzduch. Podobně uvažujeme jediný výstup spalin. Celá vnitřní geometrie komory je uvažována bez přidavných prvků a zařízení. Palivová vrstva, tj. její výška i rozložení (nehomogenity, dutiny apod.) neovlivňuje návrh geometrie ani rozčlenění zón modelu.

Co se týče tloušťky a složení stěn, můžeme uvažovat zjednodušení, že komora je dokonale izolována a nemusíme proto dále počítat s vlastnostmi a rozměry pláště komory. Pokud bychom brali v úvahu přibližný výpočet ztrát vedením skrze stěny a radiací do okolního prostředí, výpočetní prostředí Fluent nabízí možnosti zadání tloušťky bez potřeby přímého modelování geometrie pláště.



Obr. 2.1 – Zobrazení uvažované spalovací komory [20]

Po výběru zařízení přistoupíme k návrhu testovacího paliva. Jeho volba je klíčová pro výběr způsobu modelování z hlediska těchto faktorů:

- Velikost a geometrie částic paliva
- Průběh dějů napříč částicemi
- Hrubý a prvkový rozbor paliva, výhřevnost
- Fyzikální vlastnosti složek

## 2.2 Model zařízení a paliva

Máme-li stanovenou fyzikální situaci, již budeme simulovat, měli bychom se dále věnovat možnostem výpočetního software, tj. prostředí ANSYS Fluent. Tento poskytuje značné možnosti zadávání modelů a potřebných veličin přímo v uživatelském prostředí. Mimo to však později uplatníme zadání uživatelsky definovaných funkcí (UDF), tvorbě a nahrání knihovny, která doplní možnosti originálního kódu.

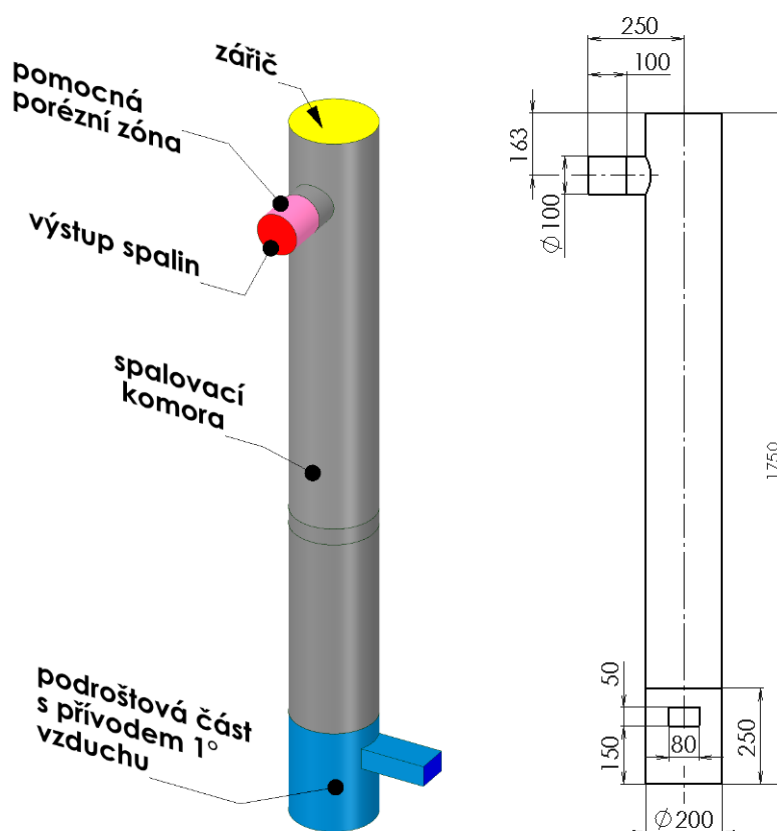
### 2.2.1 Tvorba výpočetní sítě

Po zvážení důležitých prvků spalovací komory (můžeme vytvořit jednoduchou geometrii vnitřního objemu komory, která se skládá pouze z hlavní válcové části, krátkého úseku spalovacího vzduchu a spalinovodu. Ostatní tvarové a konstrukční prvky zanedbáváme včetně

roštu, který budeme řešit pouze jako tlakovou ztrátu při proudění skrz 2D plochu, která bude rošt zastupovat.

Jako řešený objem jsme vzali zjednodušenou verzi vnitřního prostoru spalovací komory. Dále definujeme jednotlivé zóny a hranice objemu. Nabízí se rozdělení objemu na 2 části oddělené plochou představující rošt. Pod roštem pak nebudeme uvažovat chemické reakce ani zadávat přítomnost tuhých látek. Řešit zde budeme pouze proudění, přenos tepla a záření. Nadrošťová část je tvořena jednak oblastí s přiloženým palivem, jednak volným objemem a odvodem spalin. Pokusíme se zadat přítomnost tuhých látek způsobem, díky kterému nebudeme muset nadrošťovou část dále explicitně rozdělovat na lože a volný objem. K tomu nám později poslouží model porézní zóny aplikovaný na celou nadrošťovou část a uživatelsky definované skalární veličiny (User-Defined Scalars – UDS), zastupující hmotu a energii paliva. Pro každou UDS Fluent řeší transportní rovnici podobně jako u ostatních skalárních veličin (např. energie plynu).

Předem uvedeme vhodnou modifikaci rozdělení zón. Po počátečních testovacích výpočtech turbulentního proudění v komoře se ukazuje, že je vhodné oddělit koncovou část spalínovodu a definovat zde pomocnou porézní zónu, jejímž účelem je zabránit zpětnému proudění přes výtokovou plochu. Porézní zónou zajistíme usměrnění úplavů za ústím spalínovodu. Podobného výsledku bychom mohli dosáhnout i dostatečným prodloužením úseku spalínovodu. V případě zpětného proudění bychom museli vhodně specifikovat předpokládané vlastnosti plynů vracejících se ze spalínovodu, případně dohořívací komory.



Obr. 2.2 – Rozdělení objemu na jednotlivé zóny a označení hlavních rozměrů

### 2.2.2 Palivo

Pro další postup budeme předpokládat, že rozměry částic paliva jsou dostatečně malé v porovnání s rozměry lože. Pak můžeme palivové lože nahradit porézní zónou, kdy příslušné vlastnosti původní hmoty paliva jsou prostorově průměrovány a nahrazeny spojitým médiem. U modelu porézní zóny je důležitou veličinou *porozita*, tj. objemový zlomek plynné fáze)

$$\gamma = \frac{V_g}{V} \quad [-] \quad (2.1)$$

Pro výpočet hmotnosti paliva, resp. složky na jednotku objemu bude užitečné nadále pracovat se sypnou hmotností paliva  $\rho_{Bpal}$ , resp. složek paliva  $\rho_{Bpal,i}$  podle vztahu (2.2)

$$\rho_{Bpal} = \frac{m_{pal}}{V} = \frac{\rho_{pal}(V - V_g)}{V} = \rho_{pal} \cdot (1 - \gamma) \quad \left[ \frac{kg}{m^3} \right] \quad (2.2)$$

resp.

$$\rho_{Bpal,i} = \frac{m_{pal,i}}{V} \quad \left[ \frac{kg}{m^3} \right] \quad (2.3)$$

Sypná hmotnost paliva je pak dána prostým součtem sypných hmotností jednotlivých složek:

$$\rho_{Bpal} = \frac{\sum m_{pal,i}}{V} = \sum \rho_{Bpal,i} \quad \left[ \frac{kg}{m^3} \right] \quad (2.4)$$

Pro libovolnou fyzikální veličinu  $\phi_{pal}$ , která je dána hmotnostním průměrem hodnot veličiny pro jednotlivé složky  $\phi_i$ , platí vztah:

$$\phi_{pal} = \frac{\sum \phi_i \cdot \rho_{Bi}}{\rho_{Bpal}} \quad [jednotka] \quad (2.5)$$

Neznámou hodnotu veličiny pro jednu složku můžeme určit z vlastností zbývajících složek a celkové hmoty paliva jako:

$$\phi_i = \frac{1}{\rho_{Bi}} \left( \phi_{pal} \cdot \rho_{Bpal} - \sum_{i \neq j} \phi_j \cdot \rho_{Bj} \right) \quad [jednotka] \quad (2.6)$$

kde index  $j$  probíhá přes složky paliva mimo  $i$ -tou složku. Jelikož známe hustoty jednotlivých složek paliva, hmotnostní zlomky  $Y_{i,0}$  a počáteční porozitu  $\gamma_0$ , odvodíme počáteční objemové hmotnosti složek  $\rho_{B,i,0}$  následovně:

$$\rho_{B,i,0} = Y_{i,0} \cdot \frac{1 - \gamma_0}{\sum \frac{Y_{i,0}}{\rho_i}} \quad \left[ \frac{kg}{m^3} \right] \quad (2.7)$$

Velikost a geometrie částic závisí od druhu i předchozí úpravy paliva. Totéž platí i pro rozdíly ve velikosti jednotlivých částic. Je třeba vybrat dostatečně reprezentativní typ paliva, které je využíváno u nás i v zahraničí, je obecně dostupné a typické pro danou kategorii. Z celkového výčtu vybereme neřezanou slámu, použitou v práci [6]. K dispozici máme hrubý a prvkový rozbor (Tab. 2.1), fyzikální vlastnosti surové hmoty paliva i unikajících prchavých složek.

Vlhkost	Sušina		
9.58 – 12.4 % (voleno 10 %)	prchavá hořlavina	tuhá hořlavina	popeloviny
	79.28 %	16.03 %	4.69 %

C <sup>r</sup>	H <sup>r</sup>	O <sup>r</sup>	N <sup>r</sup>	S <sup>r</sup>
47.25 %	7.81 %	44.02 %	0.79 %	70.13 %

Tab. 2.1 – Hrubý a prvkový rozbor testovacího paliva [6]

Dehet	Ostatní plyny				
71.65 %	28.35 %				
	CO <sub>2</sub>	CO	CH <sub>4</sub>	C <sub>m</sub> H <sub>n</sub>	H <sub>2</sub>
	63 %	28.8 %	3.5 %	3.5 %	1.2 %

Tab. 2.2 – Složení produktů pyrolýzy [6]

Pro zjednodušení nebudeme uvažovat složení unikajících prchavých složek stejně podrobně jako [6], nýbrž zvolíme zástupnou sloučeninu, jejíž vlastnosti (molární hmotnost, výhřevnost, standartní slučovací entalpie apod.) budou vypočteny za pomoci vlastností ostatních látek. Jiné vlastnosti budou převzaty z [6].

Pro vytvoření modelu, který postihne víc druhů paliv, je vhodné zvolit zástupné složky, které budou schopny dostatečně aproximovat skutečná složení a chování paliva v průběhu spalování. Pro začátek lze vyjít z hrubého rozboru, kde hlavními komponentami jsou *prchavá hořlavina*, *tuhá hořlavina*, *voda* a *popelovina*. Vlastnosti každé z těchto složek odvodíme z chemického složení těchto komponent a prvkového rozboru paliva. Chybí-li nám vlastnosti jedné z komponent a známe-li přitom celkové vlastnosti paliva v surovém stavu, pak jsme schopni vlastnosti této komponenty odvodit. Za předpokladu, že tuhá hořlavina je převážně tvořena uhlíkem, můžeme tedy její vlastnosti vyjádřit pomocí hodnot definovaných ve Fluentu. Pro určení fyzikálních vlastností popelovin pro zjednodušení budeme uvažovat hodnoty z též databáze, stejně tak pro vlhkost. Použité vlastnosti jsou uvedeny v Tab. 2.3.

Složka paliva	$\rho \left[ \frac{kg}{m^3} \right]$	$c_p \left[ \frac{J}{kg \cdot K} \right]$	$\lambda \left[ \frac{W}{m \cdot K} \right]$	$\Delta h \left[ \frac{J}{kmol} \right]$	$M \left[ \frac{kg}{kmol} \right]$
Tuhá hořlavina	2000	1220	0.33	$-7.167094 \cdot 10^8$	12.01115
Voda	998.2	4182	0.6	$-2.858412 \cdot 10^8$	18.0152
Popelovina	600	795	0.071	–	76.94

Tab. 2.3 – Známé vlastnosti komponent paliva

Dále máme možnost získat informace o fyzikálních vlastnostech paliva. Jedná se opět o hustotu, měrnou tepelnou kapacitu a tepelnou vodivost. Namísto standardní slučovací entalpie máme k dispozici spalné teplo nebo výhřevnost, místo molární hmotnosti pak máme k dispozici prvkový rozbor paliva a hustotu. Zbývajících neznámou komponentou je prchavá hořlavina, jejíž vlastnosti odvodíme z vlastností zbylých 3 komponent a paliva. Vlastnosti zde použitého příkladu paliva uvádí [6]:

Hustota	$\rho_{pal} \left[ \frac{kg}{m^3} \right]$	410
Tepelná vodivost	$\lambda_{pal} \left[ \frac{W}{m \cdot K} \right]$	0.05
Vnější průměr stébel	$d_{out} [m]$	0.004
Vnitřní průměr stébel	$d_{in} [m]$	0.0037

Tab. 2.4 – Vlastnosti spalované slámy

Závislost měrné tepelné kapacity paliva na teplotě je dána vztahem

$$c_{p,pal} = 977.75 \cdot \ln T_s - 4144.4 \quad \left[ \frac{J}{kg \cdot K} \right] \quad (2.8)$$

Za pomoci hustoty paliva a hrubého rozboru můžeme stanovit hustotu prchavé hořlaviny.

$$\rho_{vol,s} = \frac{Y_{vol}}{\frac{1}{\rho_{pal}} - Y_{moist} \cdot \left( \frac{Y_{char}}{\rho_{char}} - \frac{Y_{ash}}{\rho_{ash}} - \frac{1}{\rho_{moist}} \right)} \quad \left[ \frac{kg}{m^3} \right] \quad (2.9)$$

Dále můžeme stanovit měrnou tepelnou kapacitu prchavé hořlaviny v palivu podobně jako ve vztahu (2.10), a to díky znalosti složení paliva v počátečním stavu:

$$c_{p,vol} = \frac{1}{\rho_{B,vol,s,0}} \left( c_{p,pal} \cdot \rho_{B,pal,0} - \sum c_{p,i} \cdot \rho_{B,i,0} \right) \quad \left[ \frac{J}{kg \cdot K} \right] \quad (2.10)$$

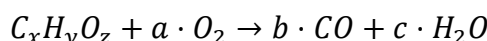
Pokud tedy budeme uvažovat prchavou hořlavinu vázanou v palivu jako jedinou sloučeninu  $C_xH_yO_z$ , pak můžeme pro určení vztahů mezi koeficienty  $x, y, z$  využít opět prvkový a hrubý rozbor. Koeficient  $x$  je v tomto ohledu volným parametrem, stanovitelným experimentálně z měření hustoty plynů pyrolýzy. Pro tento případ dle práce [12] budeme volit  $x=1,6$ . Označení  $M_i$  vyjadřuje molární hmotnost  $i$ -tého prvku.



$$y = \frac{\frac{Y_h}{M_H}}{\frac{Y_C}{M_C} - \frac{Y_{char}}{M_C}} \cdot x \quad [-] \quad (2.11)$$

$$z = \frac{\frac{Y_o}{M_{O_2}} \cdot 2}{\frac{Y_C}{M_C} - \frac{Y_{char}}{M_C}} \cdot x \quad [-] \quad (2.12)$$

Zápis zjednodušené reakce spalování volatilů vypadá takto:



Stechiometrické koeficienty jsou pak závislé na podobě sloučeniny  $C_xH_yO_z$  a stejně jako  $y$  a  $z$  jsou funkcemi koeficientu  $x$ . Pro složení paliva převzaté z [6] (viz. Tab. 2.3) pak dostaneme hodnoty:

x	y	z	a	b	c
1.60000	4.76952	1.05852	1.46312	1.60000	2.38476

Tab. 2.5 – Stechiometrické koeficienty reakce spalování sloučeniny  $C_xH_yO_z$

Standartní slučovací entalpii, která bude nezbytná pro výpočet produkce tepla u chemických reakcí, spočteme dle vztahu (2.13), při známé výhřevnosti paliva  $Q_i^r$  a výhřevnosti tuhé hořlaviny, resp. uhlíku  $Q_C$ .

$$\Delta h_{vol} = \frac{\frac{Q_i^r}{1 - Y_{moist}} - Y_C \cdot Q_C}{Y_{vol}} \cdot M_{vol} + x \cdot \Delta h_{CO} + \frac{y}{2} \cdot \Delta h_{H_2O}(g) \quad \left[ \frac{J}{kmol} \right] \quad (2.13)$$

Molární hmotnost prchavé hořlaviny stanovíme jako kombinaci molárních hmotností obsažených prvků:

$$M_{vol} = x \cdot M_C + y \cdot Y_H + z \cdot Y_{O_2} \quad \left[ \frac{kg}{kmol} \right] \quad (2.14)$$

### 2.3 Vlastnosti plynné směsi

U suchého vzduchu pak uvažujeme pro zjednodušení jeho dvě hlavní složky – dusík a kyslík o hmotnostních zlomech 0.767 a 0.233 pro suchý vzduch. Na vstupu do reaktoru pak bude zadán jako spalovací médium vlhký vzduch relativní vlhkosti 40 % při 20 °C

Dále se proto zaměříme na plyny produkované v palivovém loži. Unikající prchavou hořlavinu posuzujeme jakožto ideální plyn. Ze známé molární hmotnosti volatilů a molárního objemu  $V_m = 22.136 \text{ m}^3/\text{kmol}$  dokážeme určit hustotu volatilů ze stavové rovnice ideálního plynu.

$$\rho_{vol,g} = \frac{M_{vol}}{V_m} \cdot \frac{101325 + p}{101325} \cdot \frac{273.15}{T_g} \quad \left[ \frac{kg}{m^3} \right] \quad (2.15)$$

Další fyzikální vlastnosti (viz vztahy (2.16)–(2.17)), tj. tepelná vodivost  $\lambda_{vol,g}$

a dynamická viskozita  $\eta_{vol,g}$  jsou opět převzaty z práce [6]. Původně jsou dány čistě pro dehet. Jejich vztažení na celou směs volatilů je pak dalším zjednodušením, které se v modelu vyskytne.

$$\lambda_{vol,g} = 4.8 \cdot 10^{-4} \cdot T_g^{0.717} \quad \left[ \frac{W}{m \cdot K} \right] \quad (2.16)$$

$$\eta_{vol,g} = 1.98 \cdot 10^{-5} \left( \frac{T}{300} \right)^{\frac{2}{3}} \quad [Pa \cdot s] \quad (2.17)$$

## 2.4 Bilance spalovací komory

Pro vyhodnocení správnosti výsledků simulace nám poslouží celková bilance hmoty a energie, daná jednoduchými vztahy:

$$\int_0^t (\dot{m}_{out} - \dot{m}_{in}) dt = (m_{pal,0} - m_{pal}(t)) + (m_{g,0} - m_g(t)) \quad [kg] \quad (2.18)$$

$$\int_0^t (\dot{m}_{out} - \dot{m}_{in}) dt = (E_{pal,0} - E_{pal}(t)) + (E_{g,0} - E_g(t)) \quad [J] \quad (2.19)$$

kde  $\dot{m}$  je hmotnostní tok,  $m(t)$  a  $E(t)$  jsou celková hmota a energie paliva, resp. plynu v čase  $t$ . Počáteční hmotnost, resp. energie složek paliva v loži získáme prostou integrací přes objem spalovací komory  $V$ :

$$m_{pal,i,0} = \int_V \rho_{B,i,0} dV \quad [kg] \quad (2.20)$$

$$E_{pal,i,0} = \int_V \rho_{B,i,0} (Q_i + h_i(T_{s,0})) dV \quad [J] \quad (2.21)$$

kde  $\rho_{B,i,0}$  je počáteční sypaná hmotnost  $i$ -té složky paliva a  $h_i(T_{s,0})$  měrná entalpie  $i$ -té složky paliva při počáteční teplotě  $T_{s,0}$ , vypočítána pro referenční teplotu  $T_{ref} = 298.15 \text{ K}$ .  $Q_i$  označuje výhřevnost dané složky paliva, přičemž v případě vlhkosti je dosazeno skupenské teplo vypařování. Jednotlivé výhřevnosti jsou uvedeny v Tab. 2.6.

složka	$Q_i [MJ/kg]$
palivo (sláma)	23.255
vlhkost	$-2.454 \cdot 10^{-3}$
prchavá hořlavina	18.000
tuhá hořlavina	32.762
popelovina	0.0

Tab. 2.6 - Hodnoty výhřevností, resp. výparného tepla

Prostým součtem pak dostaneme hmotnost a celkovou energii paliva. Konkrétní hodnoty pro příklad počítaného reaktoru a slámy uvádí Tab. 2.7.

	Hmotnost [kg]	Energie [kJ]
vlhkost	0.0785	-1.835
prchavá hořlavina	0.5604	12622.162
tuhá hořlavina	0.1133	3712.241
popelovina	0.0332	-0.132
palivo	0.7854	16332.436

Tab. 2.7 - Počáteční hmotnost a celková entalpie paliva, resp. složek paliva

Celková objemová množství plynných produktů za předpokladu dokonalého spálení paliva uvedeny v Tab. 2.8.

	Objem [ $m_N^3$ ]			
	sušení	hoření prchavé hořlaviny	hoření tuhé hořlaviny	celkem
CO <sub>2</sub>	0	0.3415	0.0573	0.3988
H <sub>2</sub> O	0.0977	0.4120	0	0.5097

Tab. 2.8 - Množství uvolněných plynných produktů při dokonalém spálení paliva

Stechiometrické množství suchého spalovacího vzduchu pro dokonalé spálení paliva je pak uvedeno v Tab. 2.9.

	Spalování C <sub>x</sub> H <sub>y</sub> O <sub>z</sub>	Spalování tuhé uhlíku	Celkem
množství vzduchu [ $m_N^3$ ]	2.5181	1.0060	3.5239

Tab. 2.9 - Stechiometrická množství suchého spalovacího vzduchu

## 2.5 Stanovení okrajových podmínek

Vyjdeme tentokrát z práce [23] udávající platné hodnoty pro zde použitý model reaktoru. Zadání vstupu primárního vzduchu zvolíme odpovídající max. průtok, který udává Tab. 2.10.

Vzduch	Průtok	
	hmotnostní [kg/s]	objemový [ $m^3/s$ ]
Primární	0.0065	0.00504
Sekundární	0.0050	0.00388

Tab. 2.10 – Hodnoty průtoků primárního vzduchu [23]

Vzhledem k různému nastavování teploty v průběhu testování výpočtu jsem jako okrajovou podmínku zadal uvedený hmotnostní průtok. Celkové zadání okrajových podmínek pro inicializaci a dále hlavní fázi výpočtu udává Tab. 2.11. Hodnota intenzity turbulence  $I_t$  je počítána na základě vztahu daném v [24] za předpokladu plně vyvinutého turbulentního proudění:

$$I_t = 0.16 \cdot Re(D_h)^{-1/8} \quad [-] \quad (2.22)$$

Okrajová podmínka		Předehřev	
		ON	OFF
Teplota [K]		293.15	473.15
Intenzita turbulence [%]		5.46	5.70
hmotnostní zlomek [%]	O <sub>2</sub>	23.161	
	N <sub>2</sub>	76.243	
	H <sub>2</sub> O	0.596	
Hydraulický průměr [mm]		61.5	

Tab. 2.11 – Okrajové podmínky pro vstup primárního vzduchu

Na výstupu bude ponechána hodnota  $p_{rel} = 0 \text{ Pa}$ . Podmínky pro *backflow* jsou ponechány na výchozích hodnotách, neboť přítomnost zpětného proudění není předpokladem a model by se jí měl vyhnout za pomoci pomocné porézní zóny zmíněné v kap. 2.2.1.

Jak již bylo zmíněno, místo definování roštu jako geometrického prvku bude zadán pomocí *porézní přepážky* (*porous jump*), která je obecně použitelná pro modelování tenkých filtrů a clon. Podle [24] by měla být pro zmíněná využití být upřednostněna z hlediska vyšší stability, rychlejší konvergence a nižších výpočetních nároků. Z návrhu roštu [23] v podobě plechu o tloušťce 4 mm s 295 otvory o průměru 6 mm lze určit parametry, které Fluent požaduje pro zadání přepážky, viz Tab. 2.12:

Permeabilita [ $m^2$ ]	$4.5257 \cdot 10^{-8}$
Tloušťka [m]	0.004
Koeficient inerciálních ztrát [ $m^{-1}$ ]	4900.584

Tab. 2.12 – Parametry porézní přepážky

### 3 Tvorba fyzikálního modelu

Model turbulentního proudění a směsi reagujících plynů kombinovaný s porézní zónou jsou přímou součástí standardních funkcí, jež nabízí Fluent. Pro potřeby modelu hořící vrstvy však bude zapotřebí model porézní zóny upravit s využitím uživatelsky definovaných funkcí (UDF), uživatelsky definovaných skalárů (UDS) a uživatelem definované paměti (UDM). Práce s nimi vyžaduje znalost jazyka C. UDF tvoří styčný bod, jakési rozhraní z hlediska uživatele, který tímto způsobem může dále rozšiřovat standardní nabídku nástrojů původního SW. Prostřednictvím doplněného kódu je možné například model doplnit o možnosti exportu a importu dat, což využívá část modelu pro inicializaci palivového lože a ukládání aktuální bilance průtoků a celkového úbytku hmoty paliva. Pro začátek lze uvést výčet základních modifikací výchozího modelu porézní zóny:

1. Směs plynů bude obsahovat složku zastupující výsledné produkty pyrolýzy, jejíž vlastnosti byly odvozeny v kap. 2.2.2. Je proto nutné definovat nový materiál (v tomto případě nestlačitelný ideální plyn) pro Fluent.
2. Porozita lože je funkcí času i polohy, resp. synných hmotností složek paliva a jako taková je zadána prostřednictvím profilů pomocí UDF.
3. Směs 4 základních složek paliva, tj. vlhkosti, prchavé i tuhé hořlaviny a popeloviny zadávám v podobě čtyř UDS, které Fluent řeší stejnými metodami jako ostatní transportní rovnice (hybnosti, energie, atd.). Je tedy nutné zároveň prostřednictvím maker a funkcí definovat (naprogramovat) potřebné fyzikální veličiny, tedy členy transportní rovnice obecné veličiny. Jako transportovanou veličinu vždy volím synnou hmotnost příslušné složky. Reakce v rámci tuhé fáze včetně výměny hmoty a energie s plynnou fází proběhne prostřednictvím zdrojových členů zadaných pomocí UDF.
4. Radiační přenos energie silně závisí od optické hustoty média. Ta je v tomto případě silně nehomogenní – část objemu ohniště vyplňuje plyn s nízkou optickou hustotou, druhou část pak palivo s velmi vysokou optickou hustotou. Z tohoto důvodu se jako vhodná volba jeví Model diskretních směrů (Discrete Ordinates Model – DOM), který se typicky využívá v aplikacích spalování.
5. Fluent nenabízí možnost kombinovat tepelně nerovnovážnou porézní zónu (tj. lokálně odlišné teploty obou fází) [24]. Teplota tuhé fáze z tohoto důvodu bude počítána prostřednictvím UDS (nultá v pořadí).
6. Vyjádření teploty paliva pomocí UDS vyžaduje, aby byl do transportní rovnice pro tuto UDS doplněn zdrojový člen popisující absorpci/emisi záření tuhou fází. Odpovídajícím způsobem musí být zmodifikovány i rovnice DOM.

Samotný Fluent nabízí dostatečné množství technických možností provedení uvedených úprav (UDF, *Input parameters*, ...). Prozatím tedy není třeba uvažovat využití jiných nástrojů.

#### 3.1 Dílčí modely

Z důvodu relativně malých rychlostí ( $Ma < 0.3$ ), malých tlakových změn a tlakových a teplotních podmínek lze využít modelu směsi nestlačitelných ideálních plynů. Rovnice kontinuity pro plynnou fází a transportní rovnice složek směsi plynů mají podobu [24]

$$\frac{\partial(\rho_g \gamma)}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u} \gamma \rho) = R_g \quad [kg] \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial(\rho_g \gamma Y_i)}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla(\gamma \rho Y_i) = \nabla \cdot (\Gamma_i \nabla Y_i) + R_i \quad \left[ \frac{kg}{m^3 \cdot s} \right] \quad (3.2)$$

kde index  $i$  označuje příslušnou složku směsi. Zdrojové členy pro složky jsou dány spotřebou a produkcí látek při homogenních chemických reakcích v plynné směsi, odpařováním vlhkosti, devolatilizací a spalováním tuhého uhlíku.

Jednoduché shrnutí zdrojových členů popisujících produkci plynných látek při dějích v tuhé fázi ukazuje Obr. 3.1.



Obr. 3.1 – Způsoby sdílení hmoty mezi palivem a plynnou směsí

Rovnice kontinuity pro jednotlivé složky paliva (neuvažuje-li se jejich konvektivní ani difuzní transport) mají tvar (3.4) – (3.6). Zdrojové členy [12] jsou pro úbytek hmoty paliva definovány s kladnou hodnotou, v následujících vztazích jsou proto dosazeny s opačným znaménkem:

$$R_g = R_{moist} + R_{vol} + R_{char} \quad \left[ \frac{kg}{m^3 \cdot s} \right] \quad (3.3)$$

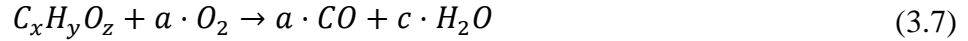
$$\frac{\partial(\rho_{B,vol})}{\partial t} = -R_{vol} \quad \left[ \frac{kg}{m^3 \cdot s} \right] \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial(\rho_{B,char})}{\partial t} = -R_{char} \quad \left[ \frac{kg}{m^3 \cdot s} \right] \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial(\rho_{B,moist})}{\partial t} = -R_{moist} \quad \left[ \frac{kg}{m^3 \cdot s} \right] \quad (3.6)$$

### 3.1.1 Hoření směsi plynů

V plynné směsi budeme uvažovat dvě homogenní reakce. Původní komplexní soustava reakcí odehrávajících se při pyrolýze a spalování jednotlivých složek plynů uvolňovaných při devolatilizaci je nahrazena jedinou reakcí (3.7). Druhá reakce (3.8) je spalování CO, který vzniká spalováním prchavých složek a tuhé hořlaviny. Stechiometrické koeficienty byly pro zadané palivo stanoveny v kap. 2.2.2.



Vztahy pro rychlosti reakcí jsou převzaty z [6]. Střední teplotu  $T_e$  spalování prchavé hořlaviny (dehtu) uvažujeme rovnou teplotě paliva  $T_s$  v případě  $T_s > T_g$ ; v opačném případě pro  $T_s \leq T_g$  je teplota  $T_e$  dána vztahem (3.9) [6], kde váhový faktor  $\alpha = 0.5$ . Střední teplota a rychlosti reakcí jsou tedy

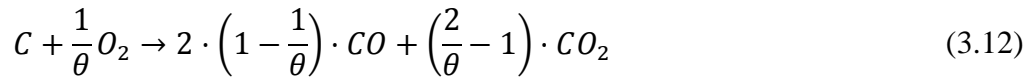
$$T_e = \alpha \cdot T_s + (1 - \alpha) \cdot T_g \quad \left[ \frac{kg}{m^3 \cdot s} \right] \quad (3.9)$$

$$R_{C_xH_yO_z} = 2.9 \cdot 10^5 \cdot \exp\left(-\frac{9650}{T_e}\right) \cdot T_e \cdot \rho_{B,vol,g} \cdot C_{C_xH_yO_z}^{0.5} \cdot C_{O_2} \quad \left[ \frac{kg}{m^3 \cdot s} \right] \quad (3.10)$$

$$R_{CO} = 3.25 \cdot 10^7 \cdot \exp\left(-\frac{15.098}{T_s}\right) \cdot C_{CO} \cdot C_{O_2}^{0.5} \cdot C_{H_2O}^{0.5} \quad \left[ \frac{kg}{m^3 \cdot s} \right] \quad (3.11)$$

### 3.1.2 Spalování tuhé hořlaviny

Už jsme si uvedli, že tuhou hořlavinu v našem modelu uvažujeme jako čistý uhlík. Spalování uhlíku je dáno rovnicí:



Stechiometrický poměr  $\theta$  závisí poměru  $r_c$  jakožto funkce teploty paliva:

$$\theta = \frac{1 + \frac{1}{r_c}}{\frac{1}{2} + \frac{1}{r_c}} \quad [-] \quad (3.13)$$

$$r_c = \frac{CO}{CO_2} = 12 \cdot \exp\left(-\frac{3000}{T_s}\right) \quad [-] \quad (3.14)$$

Rychlost reakce (3.15) je uvádí [6]. Rychlostní konstantu  $k_0$  lze určit z výrazu (3.16):

$$R_{char} = k_0 \cdot \rho_{B, char} \cdot p_{b, O_2} \quad \left[ \frac{kg}{m^3 \cdot s} \right] \quad (3.15)$$

$$k_0 = \frac{1}{\frac{1}{2} \cdot (d_{out} - d_{in}) \cdot \rho_{char} \cdot \frac{R \cdot T_s}{\theta \cdot M_C} \cdot \frac{1}{k_d} + \frac{1}{k_c}} \quad \left[ \frac{m \cdot s}{kg} \right] \quad (3.16)$$

$$k_c = 8620 \cdot \exp\left(-\frac{15900}{T_s}\right) \quad \left[ \frac{m \cdot s}{kg} \right] \quad (3.17)$$

Jelikož reakci nelze zadat stejným způsobem jako reakce plynné fáze, musíme definovat zvlášť i produkci tepla, resp. přenos tepla z tuhé do plynné fáze prostřednictvím konverze

tuhého uhlíku  $R_{char}^{heat}$ . Zdrojový člen je dán rychlostí spalování a entalpií tuhé hořlaviny.

$$R_{char}^{heat} = R_{char} \cdot h_{char}(T_s) \quad \left[ \frac{W}{m^3} \right] \quad (3.18)$$

### 3.1.3 Sušení paliva

Děj má významný vliv z hlediska rychlosti ohřevu a zapalování paliva. Vlhkost zvyšuje měrnou tepelnou kapacitu paliva a při sušení odebírá výparné teplo. Komplikuje tak zapalování přímým ochlazováním při odparu. Navíc zpomaluje ohřev paliva i nenulovým absorpčním koeficientem – vznikající pára pohlcuje dopadající tepelné záření a odnáší tak teplo, které mělo být využito k sušení. Rychlost odpařování  $R_{moist}$  je počítána pomocí rovnovážného modelu (viz kap. [7], kdy se předpokládá koexistence nasycené kapaliny i páry v tepelné rovnováze na povrchu částic paliva. Na rozdíl od kinetických modelů zde hraje roli i koncentrace (resp. parciální tlak) plynného produktu v okolní směsi. Vztah pro rychlost sušení má podobu

$$R_{moist} = k_d \cdot A \cdot (C_{H_2O}^{sat} - C_{H_2O,g}) \quad \left[ \frac{kg}{m^3 \cdot s} \right] \quad (3.19)$$

kde koncentraci vodní páry v plynu  $C_{H_2O,g}$  spočítáme z hmotnostního zlomku vodní páry  $Y_{H_2O}$  v plynné směsi a hustoty plynu  $\rho_g$ .

$$C_{H_2O,g} = Y_{H_2O} \cdot \rho_g \quad \left[ \frac{kg}{m^3_{pal}} \right] \quad (3.20)$$

Koncentrace vodní páry v plynné směsi je omezena shora tlakem nasycených par  $p_{H_2O}^{sat}$ , který je v této práci určován pomocí Tetanova vztahu (3.21) [25], platného pro teploty nad 0 °C. Model uvažuje náhlé zastavení vypařování ve chvíli, kdy je palivo již zcela vysušeno. Tato nespojitost byla ošetřena podmínkou, že sušení probíhá podle (3.19), dokud je v palivu dostatek vlhkosti na zajištění nasyceného stavu v povrchové vrstvě částic. Při podkročení dané meze je pak do vztahu (3.19) dosazena koncentrace  $C_{H_2O,s}$ . Namísto skokového zastavení odpařování pak nastává pomalý exponenciální útlum.

$$p_{H_2O}^{sat} = 0.611 \cdot \exp \left( \frac{17.27 \cdot (T_s + 273.15)}{(T_s + 273.15) + 237.3} \right) \quad [Pa] \quad (3.21)$$

$$C_{H_2O}^{sat} = \frac{p_{H_2O}^{sat}}{r_p \cdot T_g} \quad \left[ \frac{kg_{H_2O}}{m_g^3} \right] \quad (3.22)$$

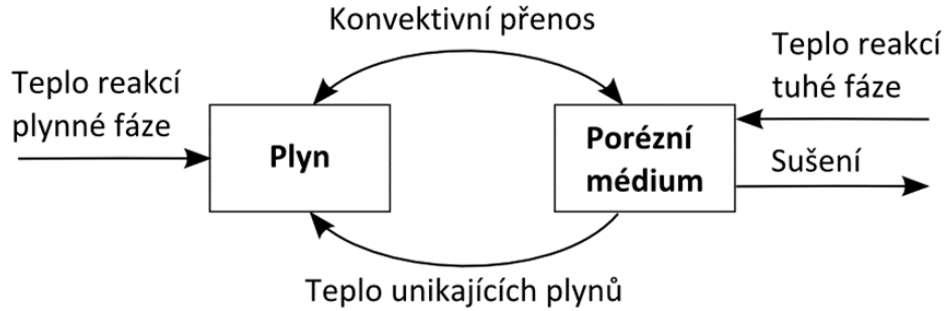
$$C_{H_2O,s} = \frac{\rho_{B,moist}}{1 - \gamma} \quad \left[ \frac{kg}{m_{pal}^3} \right] \quad (3.23)$$

Z důvodu vyhnutí se dalším komplikacím není zadána horní hranice odpařování, tj. není uvažován vliv teploty varu, kdy by se již vlhké palivo nemohlo dále ohřívat a všechno teplo by bylo spotřebováváno jen na odpaření zbylé vlhkosti – naopak *Heat sink model* uvažoval odpařování právě jen při dané teplotě varu (kap. 1.2). Zanedbání vlivu teploty varu na průběh sušení se však ukázalo během pokusného výpočtu v další kapitole přijatelné, neboť teplota čela sušení se po celou dobu pohybovala pod teplotou varu vody, viz kap. 0.



### 3.1.4 Přenos a zdroje tepla

Uvnitř reaktoru budeme uvažovat přenos tepla všemi způsoby – prouděním, vedením a zářením. Opět budeme řešit přenos uvnitř plynné a tuhé fáze odděleně. Mechanismy přenosu tepla v palivovém loži jsou zobrazeny na Obr. 3.2.



Obr. 3.2 – Schéma přenosu a zdrojů energie v palivovém loži

Pro plyn si z větší části vystačíme s původním kódem, doplněnými o uživatelsky definované vlastnosti odpařené prchavé hořlaviny. Zachování energie tuhé fáze budeme kompletně řešit pomocí UDS (skalární veličinou je teplota paliva). Fluent sice nabízí možnost využití nerovnovážného modelu porézní zóny, jež by nám umožnil mít v jednom místě různou teplotu plynů i paliva, nicméně jak se později ukáže, Fluent neumožňuje použít nerovnovážný model porézní zóny v kombinaci se zvoleným radiačním modelem Discrete Ordinates Method (DOM). Rovnice zachování energie pro plynnou fázi má podobu

$$\frac{\partial(\rho_g \gamma e_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u}(\gamma \rho_g e_g + p)) = \nabla \cdot (\lambda_{g,\text{eff}} \nabla T_g - \sum h_i \vec{J}_i) + S_g \quad \left[ \frac{W}{m^3} \right] \quad (3.24)$$

kde měrná energie  $e_g$  je definována vztahem (3.25).  $h_g$  zde zastupuje součet měrných entalpií všech složek směsi plynů.

$$e_g = h_g - \frac{p}{\rho_g} + \frac{u^2}{2} \quad \left[ \frac{J}{kg} \right] \quad (3.25)$$

$$h_g = \sum Y_i h_{g,i} \quad \left[ \frac{J}{kg} \right] \quad (3.26)$$

Celkový zdroj energie

$$S_g = +S_R + Q_{sg} \quad \left[ \frac{W}{m^3} \right] \quad (3.27)$$

Dílčí zdroje tepla  $S_{g,j}^r$  v důsledku homogenních reakcí řeší přímo Fluent. Jelikož jsme v rovnici kontinuity dodali zdrojové členy hmoty, musíme rovněž doplnit odpovídající kompenzační zdroj  $S_R$  na pravou stranu rovnice (3.24), daný vztahem (3.28). Ten může být zadán jako entalpie vzniklého plynu, přičemž jeho teplotu uvažujeme rovnu teplotě tuhé fáze.  $Y_{i,R}$  přitom označuje hmotnostní zlomky vznikajícího plynu. Druhou možností je pak vyjádření

pomocí úbytku entalpie paliva:

$$S_R = R \cdot h_R = \sum_g R_i h_i(T_s) Y_{i,R} = - \sum_s R_j h_j(T_s) Y_{j,R} \quad (3.28)$$

Kromě výměny tepla prostřednictvím výměny hmoty funguje mezi fázemi konvektivní přenos. Teplo  $Q_{sg}$  předávané mezi palivem a směsí plynů je definováno vztahem:

$$Q_{sg} = h_{sg} \cdot A \cdot (T_s - T_g) \quad (3.29)$$

Přestup tepla mezi ložem a směsí plynů je dán průtokem a vlastnostmi plynu, geometrií a velikostí částic paliva, kdy obojí je zahrnuto v součiniteli přestupu tepla  $h_{sg}$  a měrném (objemovém) povrchu  $A$  [ $\text{m}^2/\text{m}^3$ ]. Vztah pro Nusseltovo číslo uvádí [26].

$$Nu = 2 + 1.1 \cdot Pr^{\frac{1}{3}} \cdot Re^{0.6} \quad [-] \quad (3.30)$$

$$h_{sg} = \frac{Nu \cdot \lambda_g}{d_{out}} \quad \left[ \frac{W}{m \cdot K} \right] \quad (3.31)$$

Efektivní tepelná vodivost plyné směsi  $\lambda_{g,eff}$  je funkcí porozity a váženého průměru vodivostí jednotlivých složek. [24] uvádí výpočet efektivní tepelné vodivosti jako objemový průměr efektivních vodivostí obou fází, platný však jen pro rovnovážný model porézní zóny.

Rovnice pro přenos energie v tuhé fázi (3.32) v sobě nezahrnuje konvektivní přenos ani přenos prostřednictvím difuze látek.

$$\frac{\partial(\rho_{Bs} e_s)}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda_{s,eff} \nabla T_s) + S_s \quad \left[ \frac{W}{m^3} \right] \quad (3.32)$$

$$e_s = h_s \quad \left[ \frac{W}{m^3} \right] \quad (3.33)$$

$$S_s = -S_R + Q_{gs} \quad \left[ \frac{W}{m^3} \right] \quad (3.34)$$

$$Q_{gs} = -Q_{sg} = h_{sg} \cdot A \cdot (T_g - T_s) \quad \left[ \frac{W}{m^3} \right] \quad (3.35)$$

$e_s$  je energie tuhé fáze a  $\lambda_{s,eff}$  je efektivní tepelná vodivost, Spalování tuhé hořlaviny je reakce probíhající v samotném porézním médiu, tudíž musí být na rozdíl od reakcí v plyné směsi zadána pomocí UDF a stejně tak je nutné definovat i uvolněnou energii. Součet dílčích zdroj udává vztah (3.28).

Výpočet efektivní tepelné vodivosti  $\lambda_{s,eff}$  uvádí [6]. Zahrnuje přenos tepla zářením pomocí modifikace tepelné vodivosti porézního média. Zde bude využita redukováná podoba tohoto vztahu, kdy součinitele přestupu tepla  $h_{rs}$  a  $h_{rv}$  jsou rovny nule a radiace je namísto úpravy tepelné vodivosti řešena pomocí zmíněného DOM.

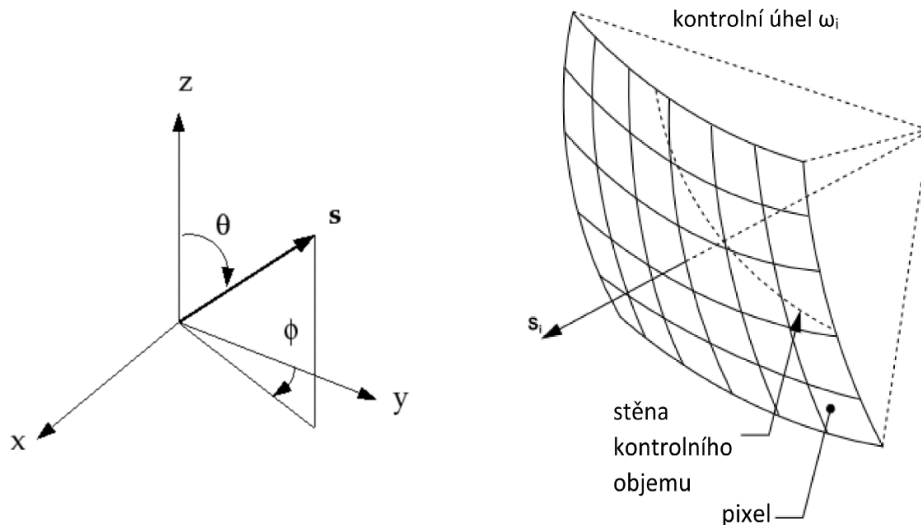
$$\lambda_{s,eff} = \lambda_{s,eff0} + \frac{0.5 \cdot \lambda_{g,eff} \cdot Re \cdot Pr}{\gamma} \left[ \frac{W}{m \cdot K} \right] \quad (3.36)$$

### 3.1.5 Radiační model

Fluent nabízí několik možností výpočtu přenosu tepla zářením. Práce [10] používá pro model přenosu tepla radiací uvnitř lože ekvivalentní tepelnou vodivost. Toto řešení pak však v sobě nezahrnuje přímou možnost výměny tepla s okolím porézní zóny skrze záření. Autoři práce [10] zapalování palivové vrstvy řeší pomocí definování okrajové podmínky pro teplotu (1073 K) na vrcholu palivového lože. Teplotu odvozují z předpokládané teploty plamene plynového zapalovacího hořáku a její fixní hodnotu drží po dobu 2 s.

Jak už bylo zmíněno v úvodu kapitoly, v objemu reaktoru se vyskytují látky s velice rozdílnou optickou hustotou, tudíž vhodnou volbou se zdá být Model diskrétních směrů.

Metodu pro přenos tepla zářením v porézní zóně využívá např. [26], kde vnějším zdrojem je sluneční záření. DOM počítá radiaci pomocí rozdělení každého z 8 oktantů plného prostorového úhlu (případě 4 kvadrantů ve 2D) do uživatelem zadaného počtu směrů, reprezentovaných v Kartézském souřadném systému pomocí množiny vektorů  $\vec{s}$ . Pro každý směr pak zvlášť řeší rovnici (6.41). Počet těchto směrů je zadáno pomocí počtu dělení úhlů  $\theta$  a  $\phi$  zobrazených na Obr. 3.3 v jednom kvadrantu (2D) resp. oktantu (3D) Kartézského souřadného systému. Vhodná jemnost dělení závisí od složitosti geometrie počítaného objemu. Pro náš případ jednoduché válcové geometrie bylo zvoleno dělení obou úhlů  $\theta$  i  $\phi$  na 3 části, tedy celkově 72 rovnic [24], přičemž pixelizace byla ponechána na výchozích hodnotách 1 a 1.



Obr. 3.3 – Zobrazení úhlů a pixelizace pro DOM model [26]

V rovnici (3.37) je  $I(\vec{r}, \vec{s})$  intenzita záření ve směru vektoru  $\vec{s}$  místě  $\vec{r}$ . Funkce  $\Phi$  popisuje anizotropii rozptylu záření.

$$\nabla \cdot (I(\vec{r}, \vec{s}) \vec{s}) + (\alpha + \sigma^{sc}) I(\vec{r}, \vec{s}) = \frac{\alpha n^2 \sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma^{sc}}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}') \Phi(\vec{s}, \vec{s}') d\Omega \left[ \frac{W}{m^3 \cdot sr} \right] \quad (3.37)$$

Předpokladem je homogenní prostředí proudící nízkými rychlostmi (mnohem menší než rychlost světla), nepolarizující a v lokální termodynamické rovnováze [26]. FLUENT poskytuje možnost použití DOM pro porézní zóny pouze v rovnovážném stavu, tj.  $T_s = T_g$ .

V rovnici (3.37) jsou pak absorpční a rozptylový součinitel  $\alpha$  a  $\sigma^{sc}$  nahrazeny novými hodnotami  $\alpha'$  a  $\sigma^{sc'}$  určenými jako objemový průměr součinitelů obou fází, viz vztahy (3.38) a (3.39).

$$\alpha' = \gamma\alpha_g + (1 - \gamma)\alpha_s \quad \left[ \frac{1}{m} \right] \quad (3.38)$$

$$\sigma^{sc'} = \gamma\sigma_g^{sc} + (1 - \gamma)\sigma_s^{sc} \quad \left[ \frac{1}{m} \right] \quad (3.39)$$

V našem případě nerovnovážného modelu přejde levá strana rovnice (3.37) na tvar:

$$\frac{\sigma}{\pi} (\gamma\alpha_g n_g^2 T_g^4 + (1 - \gamma)\alpha_s n_s^2 T_s^4) + \frac{1}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}) [\gamma\sigma_g^{sc} \Phi_g(\vec{s}, \vec{s}') + (1 - \gamma)\sigma_s^{sc} \Phi_s(\vec{s}, \vec{s}')] d\Omega$$

Plynnou fází přitom uvažujeme jako směs šedých plynů, jejíž absorpční součinitel  $\alpha_g$  je počítám jako vážený průměr z jednotlivých složek směsi (tzv. WSGGM – *Weighted Sum of Grey Gases Model*), jež mají v prostředí Fluent zadánu konstantní hodnotu pro příslušné složky, které jsou převzaty z databáze Fluentu. Pro volatily byla zvolena hodnota  $\alpha_{vol} = 0$ , stejně jako hodnota absorpčního koeficientu pro předdefinované *wood volatiles*.

Vztahy pro výpočet (3.40) a (3.41) absorpčního i rozptylového součinitele na základě charakteristického rozměru částic a absorptance povrchu porézního materiálu uvádí [26]. Jako charakteristický rozměr byl zvolen vnější průměr stébel  $d_{out}$ .

$$\alpha_s = \frac{Ab}{6.5 \cdot d_{out}} \quad \left[ \frac{1}{m} \right] \quad (3.40)$$

$$\sigma_s^{sc} = \frac{1 - Ab}{6.5 \cdot d_{out}} \quad \left[ \frac{1}{m} \right] \quad (3.41)$$

Pro naše potřeby je žádoucí upravit DOM model tím způsobem, aby umožňoval předání energie dopadajícího záření do rovnice pro energii tuhé fáze (UDS) a zároveň definovat emisi záření z tuhé fáze mající jinou teplotu než teplota plynu  $T_g$ . Snadno dostupnou možností je využít UDF pro modifikaci emisního a rozptylového členu rovnice (3.37). Nový emisní člen  $S'_e$  by měl přitom kompenzovat i starý absorpční, což vede na tvar:

$$S'_e = (\alpha - \alpha')I(\vec{r}, \vec{s}) + \frac{\sigma}{\pi} (\gamma\alpha_g n_g^2 T_g^4 + (1 - \gamma)\alpha_s n_s^2 T_s^4) \quad \left[ \frac{W}{m^3} \right] \quad (3.42)$$

Podobným způsobem vypadá modifikace rozptylového členu:

$$S'_{sc} = (\sigma^{sc} - \sigma^{sc'})I(\vec{r}, \vec{s}) + \frac{1}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}) \left[ \gamma \sigma_g^{sc} \Phi_g(\vec{s}, \vec{s}') + (1 - \gamma) \sigma_s^{sc} \Phi_s(\vec{s}, \vec{s}') \right] d\Omega \quad (3.43)$$

Odtud dále již porézní materiál zadaný v *porous zone* ve Fluentu zajišťuje pouze následující:

- odpor porézního prostředí a z něj plynoucí tlakovou ztrátu
- nárůst rychlosti v zúženém průřezu mezi částicemi paliva
- pohlcování dopadajícího záření

Ostatní jevy spojené s porézní zónou jsme již popsali pomocí UDS a kompenzačních energetických členů.

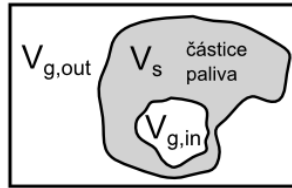
### 3.1.6 Odpor porézního média

Pro zadání odporu porézního média jsem plně využil model dostupný ve Fluentu, pouze jsem pomocí UDF zadal hodnoty porozity  $\gamma$ , permeability  $\alpha$  (resp.  $1/\alpha$ ) a součinitele inerciálních ztrát  $C_2$ . Pro výpočet  $\alpha$  a  $C_2$  však nebyla využita hodnota  $\gamma$ , nýbrž  $\gamma_b$  daná vztahem, kde  $\gamma_p$  je porozita částic paliva. Lépe význam veličin  $\gamma_b$ ,  $\gamma_p$  ukáže obrázek Obr. 3.4.

$$V_p = V_s + V_{g,in} \quad V_g = V_{g,in} + V_{g,out} \quad V = V_g + V_s \quad [m^3] \quad (3.44)$$

$$\gamma_p = \frac{V_{g,in}}{V_p} = 1 - \frac{V_s}{V_p} \quad [-] \quad (3.45)$$

$$\gamma_b = \frac{V_{g,out}}{V} = 1 - \frac{V_p}{V} = 1 - \frac{V_p}{V_s} \cdot \frac{V_s}{V} = 1 - \frac{1 - \gamma}{1 - \gamma_p} \quad [-] \quad (3.46)$$



Obr. 3.4 – Označení částí objemu porézní zóny

Tento výpočet byl však naopak zpětně použit k výpočtu porozity částic  $\gamma_p$ . Pro výpočet  $\gamma_b$  byl po konzultaci s vedoucím práce použit vztah (3.48). Vyplývá z úvahy, že při úbytku objemu  $i$ -té složky tuhé fáze vztažené na jednotu objemu lože se přímo úměrně zvýší  $\gamma_b$  o hodnotu  $\Delta_i \gamma_b$  (3.47). Konstantou úměrnosti pro danou složku je objemový faktor  $f_i$ . Celková změna porozity je pak součtem dílčí změn, podle vztahu (3.48), kde  $X_i$  je objemový zlomek složky vzhledem k objemu lože. Index 0 označuje v závislosti od použití buďto počáteční hodnotu nebo hodnotu z předchozího časového kroku.

$$\Delta_i \gamma_b = (\gamma_b - \gamma_{b,0})_i = -f_i \cdot \frac{\Delta V_i}{V} = -f_i \cdot \Delta X_i = -f_i \cdot (X_i - X_{i,0}) \quad [-] \quad (3.47)$$

$$\gamma_b = \gamma_{b,0} + \sum \Delta_i \gamma_b = \gamma_{b,0} + \sum f_i \cdot (X_{i,0} - X_i) \quad [-] \quad (3.48)$$

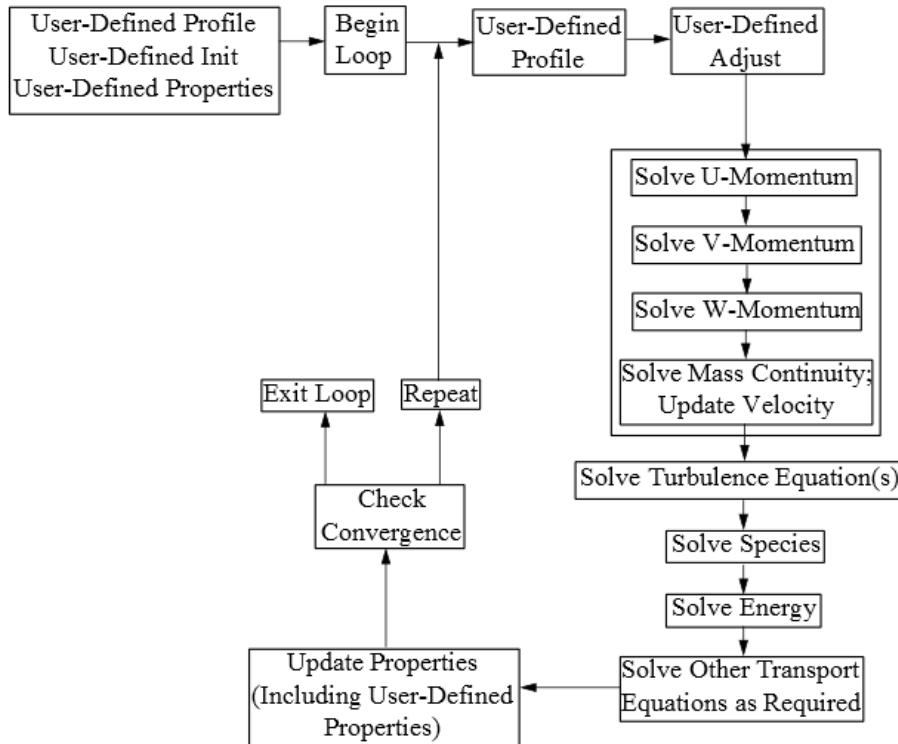
kde  $X_i$  je objemový zlomek složky vzhledem k objemu lože. Index  $0$  označuje v závislosti od použití buďto počáteční hodnotu nebo hodnotu v minulém časovém kroku.  $f_i$  jsou stanoveny empiricky. Hodnota  $0$  znamená, že úbytek objemu hmoty dané složky nevede ke změně objemu částic paliva, hodnota  $1$  pak platí pro případ, kdy jsou si obě změny objemu rovny. Známe-li faktory  $f$  pro všechny složky kromě jedné, odvodíme ji z představy úplného vymizení hmoty paliva, kdy  $\gamma_b = 1$  a  $X_i = 0$  pro všechna  $i$ . Pro objemový faktor zbývající složky  $f_k$  pak platí vztah (3.49).

$$\gamma_{b,0} + \sum f_i \cdot X_{i,0} = 1$$

$$f_k = \frac{1}{X_{k,0}} \cdot \left( (1 - \gamma_{b,0}) - \sum_{j \neq k} f_j \cdot X_{j,0} \right) \quad [-] \quad (3.49)$$

### 3.2 Implementace modelu v prostředí ANSYS Fluent

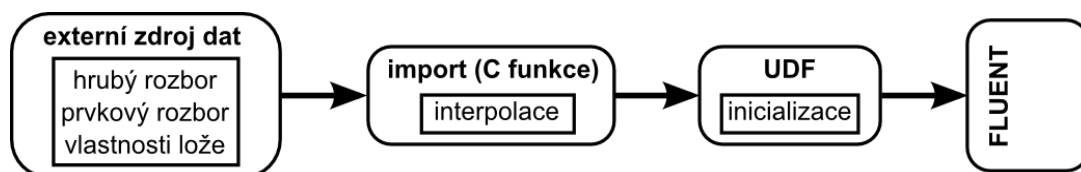
Ačkoli Fluent má pevně danou volací sekvenci jednotlivých UDF podle toho, zda jde o zdrojové členy, vlastnosti, obecné úpravy (adjustaci) veličin apod., nelze se vyhnout úvaze o uspořádání výpočtů veličin, jako jsou hmotnostní zlomky tuhé fáze, porozita aj. Algoritmus řešení pro *Pressure Based Algorithm* ukazuje Obr. 3.5.



Obr. 3.5 – Algoritmus pro Pressure-Based Segregated Solver [26]

### 3.2.1 Inicializace

Pro inicializaci výpočtu bude nejprve nutné určit počáteční hodnoty pro UDS 1 – 4, tj. složky tuhé fáze. Z dostupné analýzy vlastností paliva mám k dispozici hrubý a prvkový rozbor, porozitu, hustotu materiálu paliva a sypanou hmotnost. Tyto veličiny jsou pro pohodlnější obsluhu zpracovány mimo Fluent v tabulkovém editoru a před začátkem výpočtu exportovány do textových souborů. Hodnoty z těchto souborů (tj. objemové zlomky, porozita lože a porozita částic paliva) jsou následně načteny prostřednictvím UDF a doplňujících funkcí (Obr. 3.6). Pokud chceme využít možnost zadání nehomogenního složení a počátečního rozložení paliva, je možné zadat hodnoty v uzlech pravoúhlé mřížky, přičemž při inicializaci jsou hodnoty v centrech buněk výpočtové sítě získány pomocí lineární interpolace mezi uzly původní pravoúhlé mřížky. V samotné UDF pak následuje výpočet počátečních hodnot sypaných hmotností složek a tyto hodnoty jsou následně předány Fluentu.



Obr. 3.6 – Postup inicializace hmoty paliva

### 3.2.2 Vlastnosti složek tuhé fáze

V průběhu testování modelu jsem zprvu testoval chování jednotlivých dílčích částí. Žádoucí přitom bylo omezit složitost modelu na co nejmenší míru. K tomu patřila i volba podmnožiny budoucích složek paliva, např. pro účely testování modelu sušení postačilo počítat s inertním porézním materiálem nesoucím v sobě daný podíl vlhkosti.

Každá ze složek je v kódu zastoupena zvláštní funkcí, která podle zadaného parametru vrací hodnotu potřebné veličiny uvnitř jednotlivých buněk sítě. Těla jednotlivých funkcí jsou uložena ve zvláštních zdrojových souborech:

- *PZM\_moisture.c*,
- *PZM\_volatiles.c*,
- *PZM\_fixedcarb.c*,
- *PZM\_ash.c*.

Při změně složení tuhé fáze je třeba při vytváření knihovny UDF zahrnout příslušný zdrojový soubor. V těchto souborech jsou zároveň zahrnuta makra pro výpočet vlastností, jako jsou měrná tepelná kapacita a entalpie, tepelná vodivost a hustota. Jednotlivé funkce zastupující složky paliva jsou vloženy jako prvky pole funkcí `solid` definovaného v souboru `PZM_mix.c`. Tím je umožněno volání jednotlivých funkcí přes index pole `solid`, díky čemuž můžeme snadno definovat další veličiny jako je celková hustota materiálu paliva, celková tepelná kapacita apod. Funkce `solid` je schopná vracet pro každou složku

- sypanou hmotnost,
- hustotu,

- hustotu z předchozího časového kroku,
- hmotnostní zlomek v palivu,
- objemový zlomek v palivu,
- objemový zlomek z předchozího časového kroku,
- hmotnostní zdroj,
- měrnou entalpii,
- měrnou entalpii z předchozího časového kroku,
- tepelnou vodivost.

### 3.2.3 Linearizace zdrojových členů

Z hlediska stability bylo vhodné linearizaci provést, neboť například prakticky všechny zdrojové členy jsou nelineární funkcí teploty a naopak zdroje hmoty a energie alespoň v některé z fází spalování významně ovlivňují teplotní pole. Doporučený způsob provedení podle [27] a [28] vyžaduje znalost derivace příslušného zdrojového členu podle transportované veličiny. Pro zpřehlednění tvorby UDF jsou potřebné vztahy pro výpočet zdrojových členů umístěny v podobě maker ve zvláštním hlavičkovém souboru *PZM\_phys.h*. Poslední parametr každého z maker přitom identifikuje požadovanou derivaci zdrojového členu.

### 3.2.4 Bilanční kontrola

Kontrola konzervativnosti modelu je důležitá při spouštění „finálních“ výpočtů jako součást validace výsledků a počáteční fázi vývoje, testování a rozšiřování modelu. Fluent na jednu stranu nabízí přímo prostředky vhodné pro zjištění toků látky a energie skrze definované plochy, avšak pro komplexnější případy jako právě heterogenní směs palivo-plyn není tato kontrola již dostatečná. Snahou bude vytvořit funkci umožňující bilanční kontrolu libovolně zvolené množiny veličin. Transportní rovnice v integrálním tvaru pro veličinu  $\phi$  má podobu:

$$\int_V \frac{\partial(\gamma \rho_g \phi + \rho_{Bs} \phi)}{\partial t} dV + \oint_{\Gamma} \gamma \rho \phi (\vec{u} \cdot \vec{n}) d\Gamma + \oint_{\Gamma} (\vec{J}_\phi \cdot \vec{n}) d\Gamma = \int_V R_\phi dV \quad \left[ \frac{\text{jednotka}}{\text{m}^3 \cdot \text{s}} \right] \quad (3.50)$$

První člen na levé straně se nazývá *akumulační* (dále označený  $A$ ), druhý člen *konvektivní* (dále značený  $K$ ). Třetí člen na levé straně obsahuje ostatní toky veličiny (u složek difúzní přenos, u energie vedení tepla stěnou apod.), dále značen  $D$ . Na pravé straně zbývá celkový zdrojový člen, označený  $S$ . Členy  $K$  a  $D$  osahující toky veličin přes hranici objemu lze ještě rozdělit podle vzájemné orientace normálového vektoru a vektoru toku. Po jednoduché diskretizaci budou mít členy podobu součtů uvedených v Tab. 3.1.

$A_g = \sum_V \frac{\gamma_i \rho_{g,i} \phi_i - \gamma_{i-1} \rho_{g,i-1} \phi_{i-1}}{\Delta t} \cdot \Delta V$	$A_s = \sum_V \frac{\rho_{Bs,i} \phi_i - \rho_{Bs,i-1} \phi_{i-1}}{\Delta t} \cdot \Delta V$
$K_{in} = - \sum_{\Gamma_{in}} \kappa_{in} \gamma_i \rho_{g,i} \phi_i (\vec{u}_i \cdot \vec{n}) \Delta \Gamma_{in}$	$K_{out} = \sum_{\Gamma_{out}} \kappa_{out} \gamma_i \rho_{g,i} \phi_i (\vec{u}_i \cdot \vec{n}) \Delta \Gamma_{out}$



$$D_{in} = - \sum_{\Gamma_{in}} \kappa_{in} (\vec{J}_{\varphi} \cdot \vec{n}) \Delta \Gamma_{in}$$

$$D_{out} = \sum_{\Gamma_{out}} \kappa_{out} (\vec{J}_{\varphi} \cdot \vec{n}) \Delta \Gamma_{out}$$

$$S = \sum_V R_{\varphi,i} \cdot \Delta V$$

Tab. 3.1 – Definice členů bilanční kontroly

Koeficienty  $\kappa_{in}$  a  $\kappa_{out}$  jsou funkce skalárního součinu zmíněných vektoru toku  $\vec{f}$  definované následovně:

$$\kappa_{in} = \begin{cases} 0, & \vec{f} \cdot \vec{n} \geq 0 \\ 1, & \vec{f} \cdot \vec{n} < 0 \end{cases}$$

$$\kappa_{out} = 1 - \kappa_{in}$$

Ve funkci pro bilanční kontrolu průtoků budou použity výše uvedené veličiny a celková nerovnováha tedy bude dána vztahem (3.51):

$$E = A + (K_{out} - K_{in}) + (D_{out} - D_{in}) - S \quad \left[ \frac{\text{jednotka}}{m^3 \cdot s} \right] \quad (3.51)$$

Funkce pro bilanci je uložena v souboru `PZM_bal.c` s inkludovaným hlavičkovým souborem `PZM_bal.h` obsahujícím makra, jež funkce využívá. Prozatím je funkce postavena způsobem, kdy uživatel musí definovat vždy počet bilancovaných veličin pomocí symbolické konstanty uvedené ve zmíněném zdrojovém souboru. Pak ve zdrojovém souboru doplní řádek, na kterém bude voláno makro `compute_quantity`, jehož jednotlivé argumenty slouží k identifikaci, pojmenování bilancované veličiny a identifikaci proměnných, s nimiž bude makro počítat. Hodnoty veličiny jsou zadávány pomocí standartních maker, jež Fluent poskytuje (např. energie plynu je dostupná skrze makro `C_E(c, t)`).

Výše uvedenou bilanci časových změn zadaných veličin může uživatel spustit ve Fluentu prostřednictvím záložky *Execute on Demand*. Následně se vypíší hodnoty všech výše uvedených členů a celková nerovnováha pro jednotlivé veličiny. Zároveň dojde k jejich zapsání do textového souboru (případě k aktualizaci existujícího) na adresu zadanou v hlavičkovém souboru `PZM.h`.

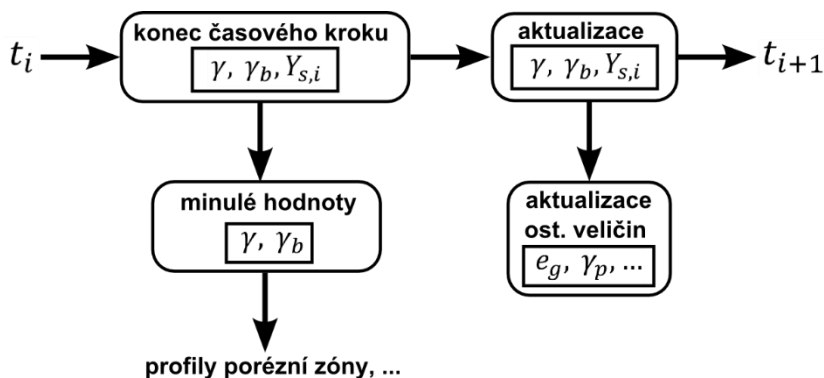
### 3.2.5 Obecné poznámky k výpočtům veličin

Jak se ukázalo v průběhu vytváření modelu, k úspěšnému zprovoznění výpočtu potřebujeme kromě veličin dostupných pomocí standartních maker (např. `C_T(c, t)` pro teplotu plynu) zavést i vlastní, realizované prostřednictvím tzv. User Defined Memory (UDM). Jejich účelem je uložení hodnot spočítaných v dané fázi výpočtu pro každou buňku zvlášť, nikoli jako jedinou proměnnou. Použití UDM nám umožní následující:

- vizuální kontrola hodnot (zdrojových členů, profilů apod.) pro účely testování modelu
- uložení hodnot z předchozího časového kroku těch veličin, u kterých toto Fluent přímo neumožňuje (např. entalpie, energie)

- uložení hodnot veličin, které mají být aktualizovány vždy na daném místě iterační smyčky

Hodnoty hmotnostních zlomků složek tuhé fáze a porozity jsou ukládány tímto způsobem. Při testování nestacionárního výpočtu se ukázalo nevhodné používat aktuální hodnotu porozity pro výpočty profil viskózního a inerciálního odporu porézního média. Stabilního běhu programu bylo dosaženo využitím hodnoty porozity z předchozího časového kroku, viz Obr. 3.7.



Obr. 3.7 – Aktualizace porozity a souvisejících veličin

### 3.3 Test funkčnosti knihovny

Zkouška bude provedena na jednoduchém 2D případě proudění skrze kanál obsahující krátkou porézní zónu. Stěny kanálu za porézní zónou mají na daném úseku zadán konstantní tepelný příkon. Do kanálu vstupuje vzduch o teplotě 20 °C, jež následně protéká porézní zónou, která je tímto vysušována. Z druhé strany porézní zóny je silně ohřívána stěna, která funguje jako tepelný zářič. Porézní materiál je vlivem proudu vzduchu a ohřevu dopadajícím zářením vysušován. Zároveň je zapnut model heterogenní reakce spalování tuhého uhlíku, tudíž jsou počítány i složky plynné fáze: O<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub>. Jde o test z raného stadia kódu, kde objemové součinitele pro obě fáze byly položeny rovny 1. Díky tomu má úbytek vlhkosti za následek pokles tlakové ztráty. Tento porézní materiál bude mít tedy 2 složky o zvolených hmotnostních zlomcích a objemových součinitelích, například:

-	$Y_{i,0}$	$f_i$	Počáteční hodnoty		Výkon zářiče
Vlhkost	0.3	1.0	$T_g = T_s [K]$	$\dot{v}_{in} [m \cdot s^{-1}]$	40 kW
Tuhý uhlík	0.7	1.0	293.15	0.5	

Tab. 3.2 – hodnoty pro zkušební případ 2D kanálu

Postup doplnění uživatelského modelu porézní zóny zahrnuje po vytvoření case následující body.

- *Externí zdroj dat.* V souboru *PZM.xlsm* v listu *BOUNDING\_BOX* uživatel najde 2 tabulky. Pomocí první z nich je možno zadat rozměry a umístění pravoúhlé 3D mřížky, v jejíž uzlech můžou být zadány požadované hodnoty hmotnostních zlomků a porozity. Hodnoty mezi uzly jsou potom pomocí funkce *interpolate3d* (definované v *PZM\_init.c*) získány lineární interpolací. Ve zkušebním případě nám postačí zadání homogenního složení, tudíž tuto tabulku můžeme ponechat s hodnotami jako na *Obr. 3.8*.

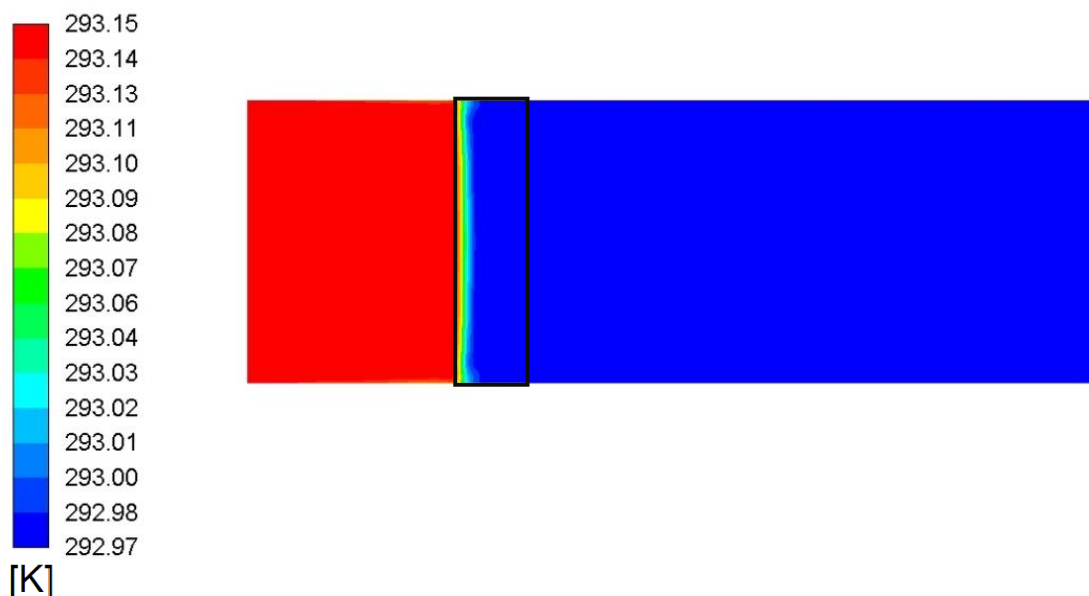
direction	x	y	z				
bounding_box_dimensions	1.000	1.000	1.000				
box_origin_box_coordinates	0.000	0.000	0.000				
box_origin_global_coordinates	0.000	0.000	0.000				
no_of_nodes	2	2	2				
cell_dimension	1.00000	1.00000	1.00000				
				EXPORT ALL TO .txt			
component_names/no_of_c.:	2						
MOISTURE							
FIXEDCARB							

*Obr. 3.8 – Obsah listu BOUNDING\_BOX*

- *Umístění souborů.* K dalším krokům patří změna konstanty *WORK\_DIR* v souboru *PZM.h* na adresu složky s aktuálním *case*, kde jsou uloženy i zmíněné textové soubory a úprava pole funkcí *solid* (typ *mix* je definován v hlavičce *PZM\_mix.h*) definovaného v *PZM\_mix.c*. Pro případ 2D kanálu by definice pole vypadala takto:

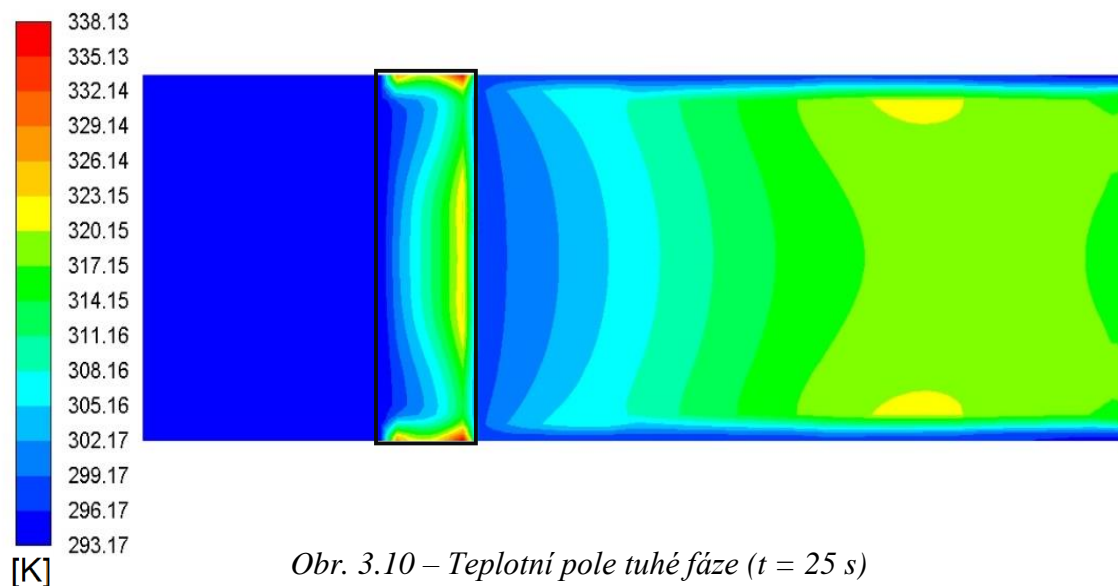
```
mix solid[] = {&moisture, &fixedcarbon};
```

K dalším krokům patří všeobecné zadání *case* včetně příslušného počtu UDS. Po uvedeném nastavení je testovací simulace inicializována s konstantní teplotou 293.15 K.

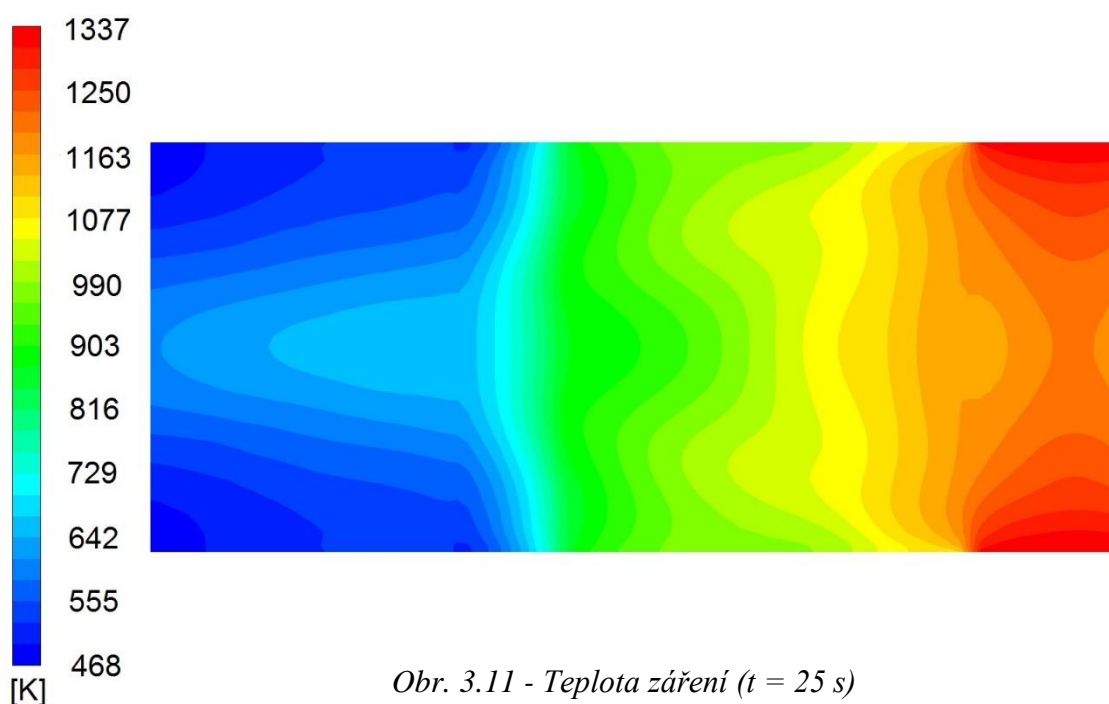


*Obr. 3.9 – Počáteční stav teploty tuhé fáze ( $t = 0$  s)*

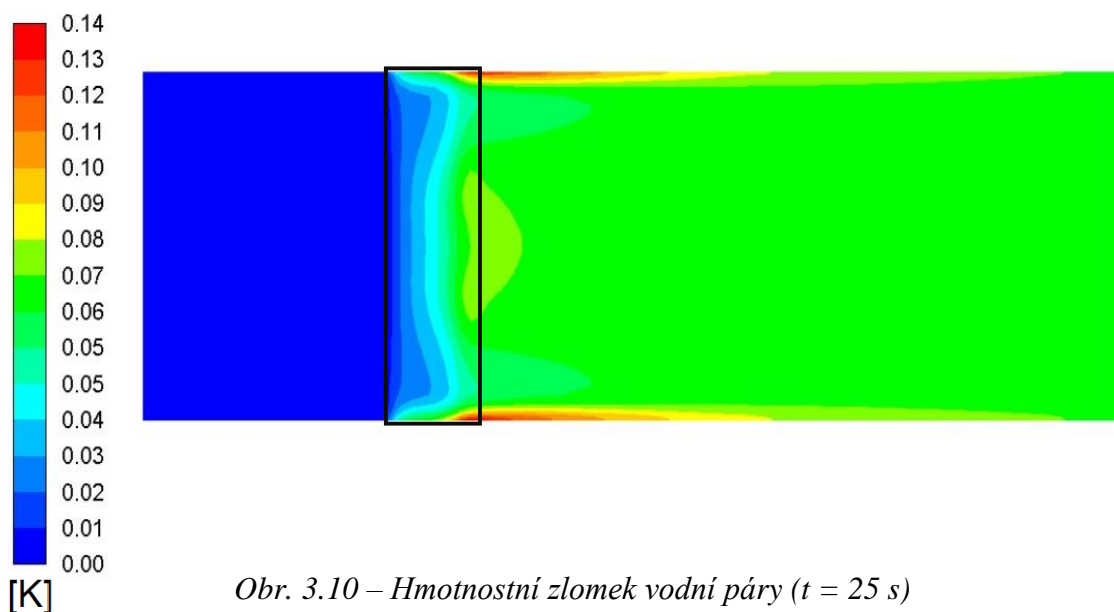
Na Obr. 3.9 je zachyceno stacionární teplotní pole tuhé fáze. Jelikož celý kanál je tvořen jedinou zónou, je teplota tuhé fáze definována i mimo vyznačenou porézní zónu, nicméně tepelné děje v rámci tuhé fáze zde nemají díky  $\gamma \approx 1$  žádný vliv. Pro stacionární výpočet jsou zapnuty zdroje plynu, naopak vypnuty jsou zdroje pro tuhou fázi a rovněž ohřev stěn.



Obr. 3.10 – Teplotní pole tuhé fáze ( $t = 25$  s)



Obr. 3.11 - Teplota záření ( $t = 25$  s)



Obr. 3.10 – Hmotnostní zlomek vodní páry ( $t = 25$  s)

### 3.4 Demonstrace modelu reaktoru na hrubé síti

Pro demonstraci vytvořeného modelu byla zvolena velmi hrubá síť, jejímž smyslem bylo ověřit funkčnost všech dílčích modelů najednou. Hrubá síť byla zvolena hlavně z důvodu časové náročnosti simulace, neboť délka časového kroku se pohybuje v řádu  $10^{-3}$  s. Přitom typická délka simulace (simulovaného časového intervalu) dávkového reaktoru tohoto typu je v řádu desítek minut.

Nabízelo se několik experimentálních postupů. Jelikož většina vlastností paliva a podmínek spalování byla převzata z práce [6], prvním pokusem bylo spuštění modelu podle postupu uvedeného právě zde. Experimentální reaktor použitý k validaci modelu uvedeném v [6] používal k zapálení paliva plynový hořák umístěný nad povrchem lože. Na počátku experimentu pak byl zapnut přehřev spalovacího vzduchu na 573 K a zažehnut zapalovací hořák. Jakmile měření pod povrchem lože zaznamenalo nárůst teploty, hořák byl vypnut. V modelu je zapálení řešeno zadáním fixní teploty 1073 K na povrchu lože po dobu 2 s.

Zapálení pomocí této podmínky ve zde uvedeném testovacím příkladu způsobovalo značné problémy se stabilitou výpočtu. Další volbou byl postup podle práce [18]. Zde autoři použili experimentální reaktor používající pro zapálení vrstvy paliva elektrický zářič. Experiment se skládal z těchto kroků:

1. *Počáteční stav.* Zářič je vypnut. Teplota paliva neuvedena, předpokládám teplotu 293 K na základě nejnižší teploty spalovacího vzduchu uvedené v [18].
2. *Předsušení.* Profukování paliva spalovacím vzduchem o teplotě 293, 423 a 473 K.
3. *Zapalování.* Jakmile měření teploty u povrchu lože dosáhne 343 K, dojde k zapnutí zářiče.

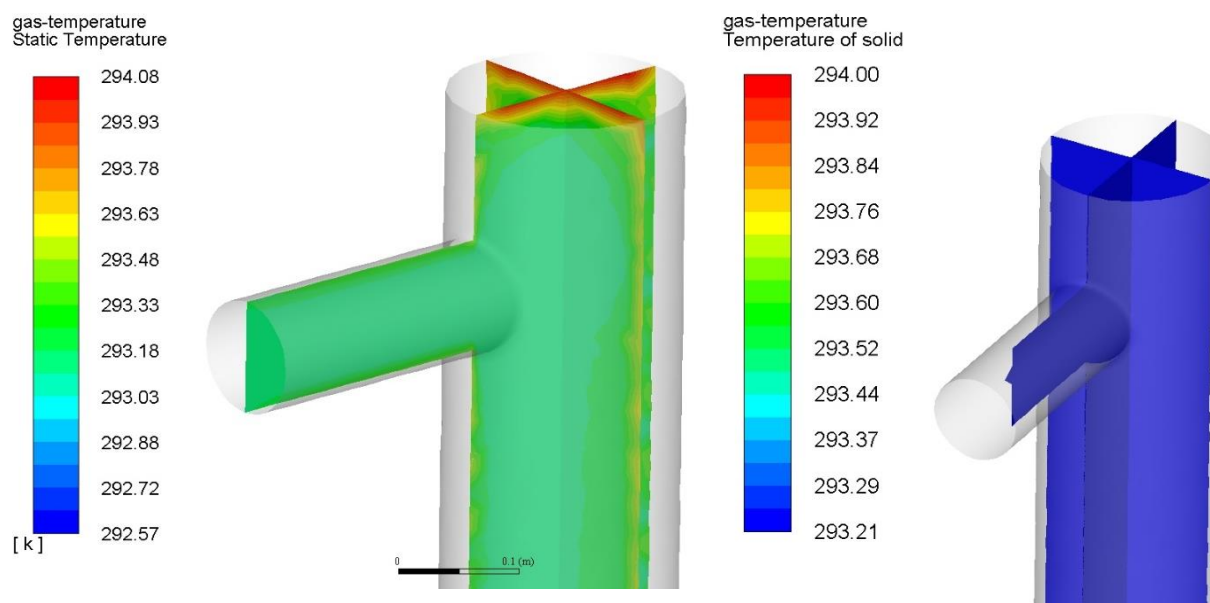
Postup pro spuštění testovací simulace na modelu experimentálního reaktoru [23] a paliva podle [6] sestává z:

1. Inicializace lože, počáteční teplota paliva i vzduchu v reaktoru 293.15 K.
2. Inicializace profouknutím reaktoru ve stacionárním výpočtu při teplotě spalovacího vzduchu 293.15 K.
3. Spuštění nestacionárního výpočtu, spalovací vzduch předehříván na 473.15 K. Vzhledem k teplotám byly pro tuhou fázi zapnuty pouze modely sušení a devolatilizace.
4. Jakmile minimální teplota tuhé fáze uvnitř reaktoru dosáhne 343 K, dojde k zapnutí zbývajících modelů a radiačního zářiče.

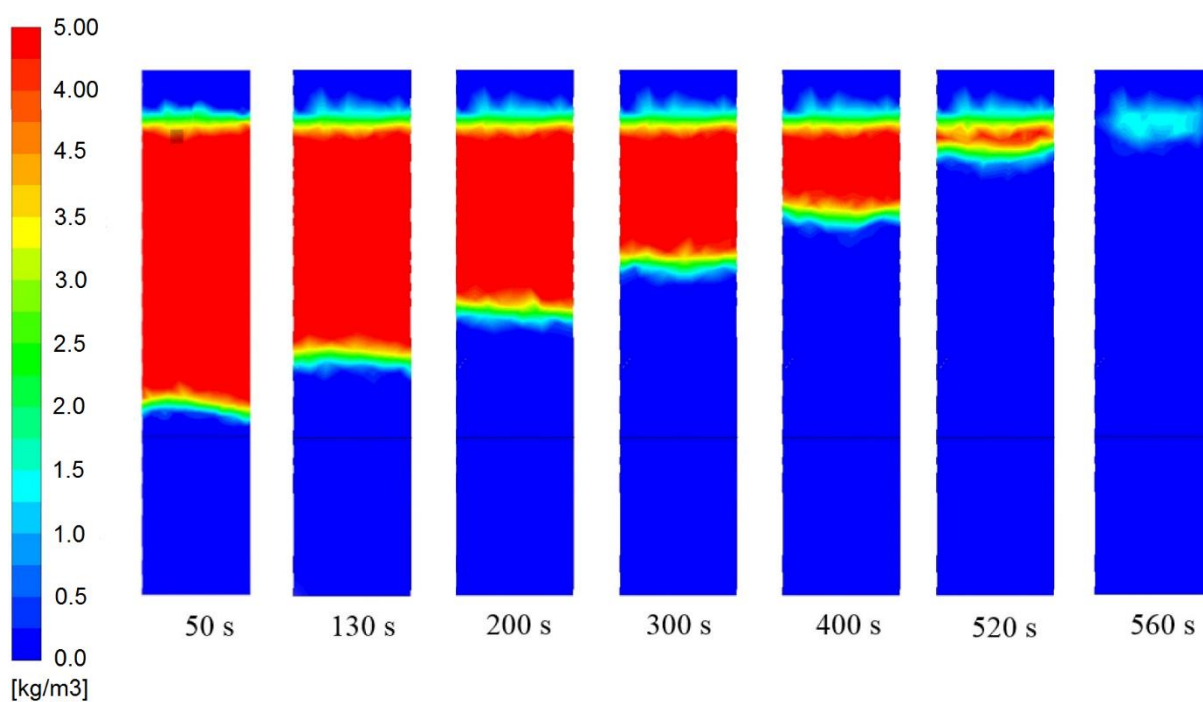
Po nastavení podmínek dle postupu uvedeném v [18] (připomenutí – vypnutý zářič, nepředsušená studená vrstva paliva) nejprve muselo proběhnout počáteční profouknutí vrstvy paliva ve steady režimu. Přitom jsou zdroje (resp. úbytek) tuhé fáze odpojeny, zatímco zdroje pro plyn jsou zapnuty. S tím je třeba počítat u bilančních funkcí. V nestacionárním výpočtu je produkce plynů kompenzována opačnou hodnotou akumulárního členu tuhé fáze (tedy jejím úbytkem). Ve stacionárním výpočtu, kdy je akumulace přirozeně rovna nule, musí bilanční funkce od nerovnováhy odečítat příslušný zdroj plynu. Pro stacionární výpočet byly zapnuty tyto modely a zdroje:

- *Proudění a turbulentní model*
- *Hmotnostní zdroje plynné fáze.* V objemu vznikala pára i navzdory stacionárnímu stavu paliva. Účelem byl snazší přechod na nestacionární výpočet, kdy by v objemu došlo ke skokové změně proudového pole, jak se ukázalo během počátečních zkoušek.
- *Přestup tepla mezi fázemi.* Jelikož v rovnicích pro energii již byly zadány příslušné zdroje, resp. přestup tepla mezi fázemi vlivem vzájemné výměny hmoty, bylo nutné mít zároveň zadán i zdroj konvektivní výměny tepla mezi fázemi.
- *DOM.* Důležité bylo při jeho zapnutí pozorovat, zda dojde k výraznému narušení teplotních polí v důsledku hrubých chyb, např. špatně zadaných kompenzačních zdrojů

Při počítání stacionárních dějů došlo k mírnému nárůstu teploty v blízkosti stěn reaktoru. Toto zvýšení pak už po zapnutí nestacionárního modelu nebylo patrné. Při vypnutí DOM (a pochopitelně za současného odebrání radiačního zdrojového členu v rovnici energie tuhé fáze) se efekt vůbec neobjevil.

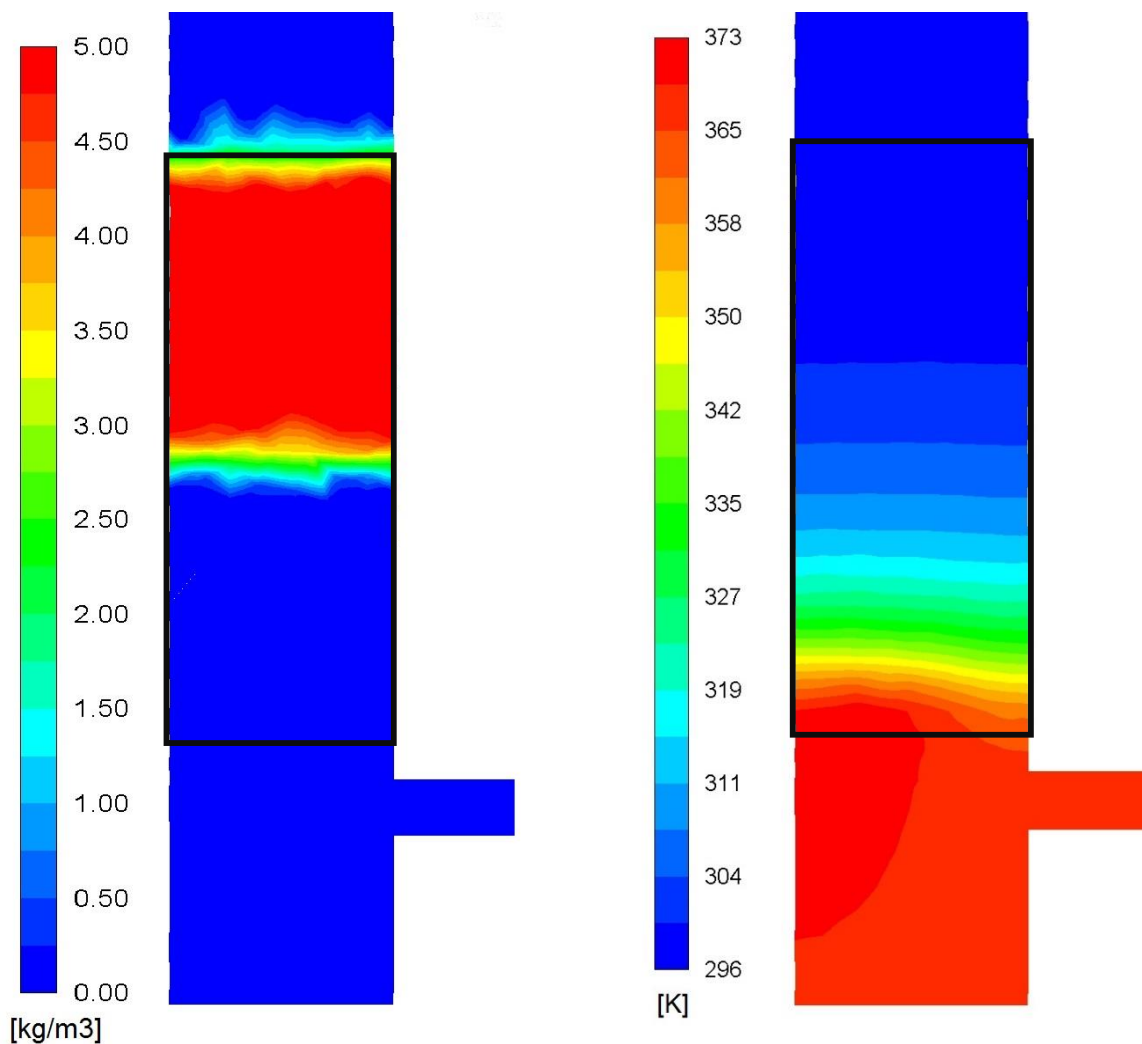


Obr. 3.13 - Teplota plynu v blízkosti stěn při stacionárním a nestacionárním výpočtu



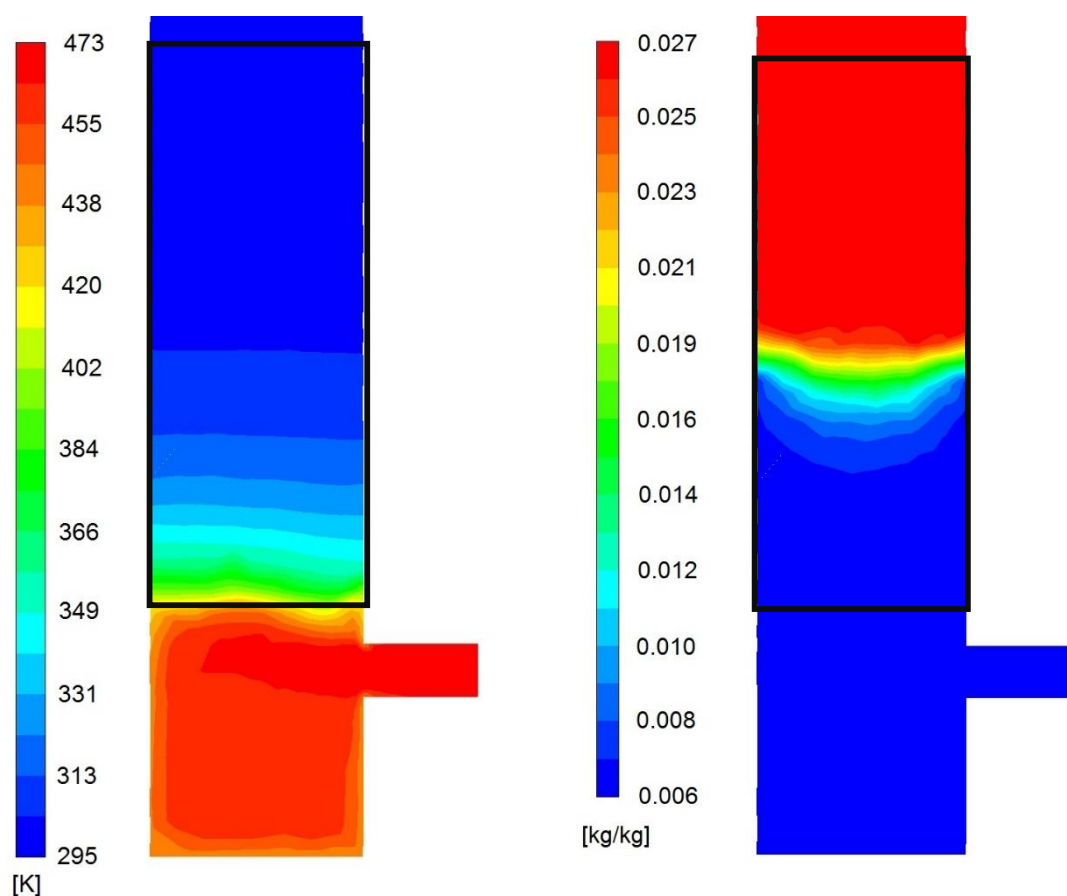
Obr. 3.11 - Časový vývoj rozložení objemové hmotnosti vlhkosti  $\rho_{B,moist}$

Z výsledků je vidět mimo jiné, že zanedbání vlivu teploty varu na rychlost sušení paliva je přijatelné. Obr. 3. ukazuje srovnání polohy fronty sušení a profilu teploty paliva. Černým rámečkem je znázorněna poloha palivového lože. V zobrazeném čase  $t = 250$  s došlo k prohřevu pouze spodní části palivové vrstvy, kde se však již vlhkost prakticky nevyskytuje (objemová hmotnost je v této části menší než 0.1 % původní hodnoty).

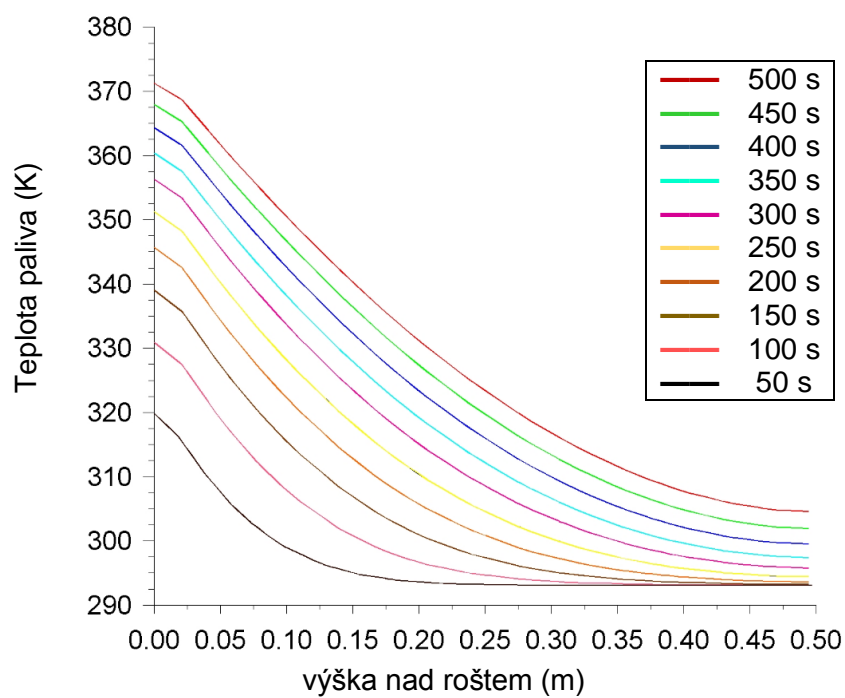


Obr. 3.15 - Porovnání fronty sušení a rozložení teplot paliva

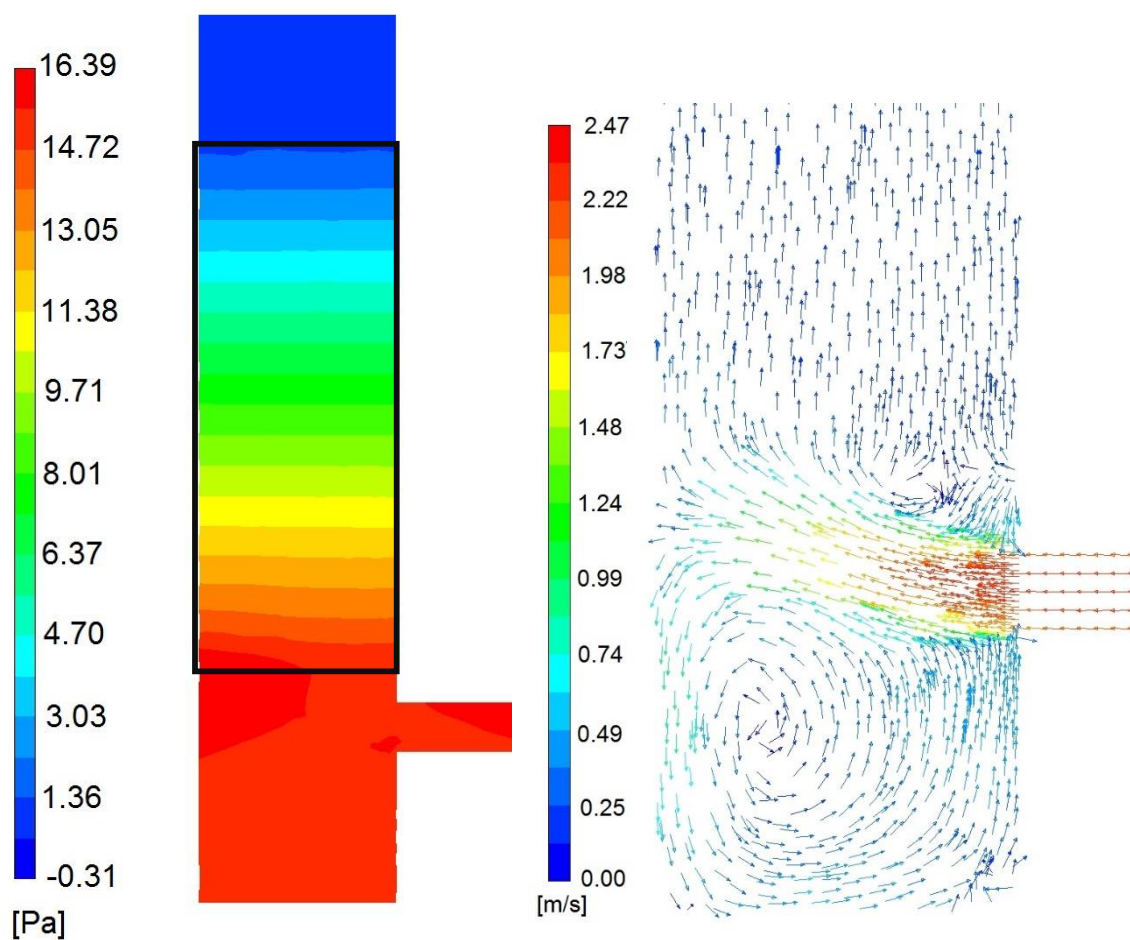




Obr. 3.16 - Profil teploty plynu (vpravo) a hmotnostního zlomku vodní páry



Obr. 3.17 - Časový vývoj teplotního profilu paliva v ose spalovací komory



Obr. 3.18 - Relativní tlak napříč ložem a naznačení vektorů rychlosti v podroštové části

## Závěr práce

Hlavním předmětem práce byla tvorba zjednodušeného nestacionární 3D modelu palivové vrstvy s využitím modelu porézní zóny. Hlavními nástroji byl komerční softwarový balíček ANSYS Fluent, následně doplňovaný o uživatelsky definované funkce (UDF).

Prvním z dílčích cílů této práce bylo stručné uvedení čtenáře do problematiky CFD modelů roštového spalování biomasy. Je mu zmíněna obtížnost přímých měření a potřeba znalosti větších detailů spalovacích procesů, než jsou nám přímo experimentálně dostupné. Následuje obeznámení se základními skupinami modelů roštového spalování, pohybující se na různých úrovních detailnosti rozboru fyzikálně-chemických dějů a různých úrovních provázanosti s konkrétními zařízeními. Z nabízených přístupů je v další části práce zvolen model kontinua a hmota paliva je dále řešena jako porézní médium.

Prvním bodem návrhu modelu je volba vzorového zařízení, z něhož bude převzata geometrie, okrajové podmínky pro vstup látek, tj. jaké palivo lze daném zařízení spalovat, jaké podmínky jsou kladeny na spalovací vzduch (množství a úprava) a jaký je provozní režim (dávkové nebo kontinuální spalování, kolísání výkonu nebo vlastností paliva apod.). Pro účely testování se jako vhodná předloha jevil experimentální reaktor navržený ÚPI, jež poskytoval dostatek informací k sestavení modelu geometrie a určení okrajových podmínek. Zkušebním palivem pak byla neřezaná sláma použitá v pracích jiných autorů pro testování a validaci modelů porézní zóny.

Ze získaných informací vzešlo rozhodnutí vytvořit model spalování tuhých paliv zahrnující homogenní i heterogenní reakce, radiální přenos tepla popsáný Modelem diskretních směrů. Jelikož šlo počáteční fází vývoje modelu, složení obou fází bylo uvažováno v poměrně jednoduché formě, tj. 4 základní komponenty paliva – vlhkost, prchavá a tuhá hořlavina a popelovina. Komplexní směs jednoduchých plynů a složitějších uhlovodíků byla nahrazena zástupnou sloučeninou, jejíž vlastnosti jsou odvozeny na základě výhřevnosti, prvkového a hrubého rozboru slámy.

Jelikož Fluent přímo nenabízí dostatečně komplexní model porézní zóny, jež by umožňoval zadání všech heterogenních reakcí i radiace, byly energie a komponenty hmoty paliva popsány pomocí Uživatelsky definovaných skalárních veličin (UDS), díky čemuž bylo možné zkombinovat model termicky nerovnovážné porézní zóny s Modelem diskretních směrů pro radiaci.

Při pokusných spouštěních se podařilo provést simulaci sušení kompletně zadaného paliva na pevném loži. Pro odpařování vlhkosti byl přitom využit rovnovážný model. Výsledky ospravedlňují fakt, že v modelu odpařování vlhkosti není uvažován vliv teploty varu vody, neboť fronta sušení se v reaktoru pohybovala rychleji než nárůst teploty.

Jelikož v této práci již nezbyl prostor na detailní zkoušku kompletního spalovacího procesu, další pokračování směrem, kterým se vydala tato práce, bude spočívat právě ve využití nastíněného modelu pro předpovědi spojené s následným experimentem.

## Seznam použitých zdrojů

- [1] **Baláš, Marek.** *Kotle a výměníky tepla.* Brno : Akademické nakladatelství CERM®, s.r.o., 2013. str. 119. ISBN 978-80-214-4770-7.
- [2] **Chungen Yin, Lasse A. Rosendahl, Søren K. Kær.** Grate-firing of biomass for heat and power production. *Progress in Energy and Combustion Science.* 2008, Sv. 34, 6, stránky 725-754.
- [3] **Mastný, Petr, a další.** *Obnovitelné zdroje elektrické energie.* Praha : České vysoké učení technické v Praze, 2011. str. 256. ISBN 978-80-01-04937-2.
- [4] **Yang, Yao Bin, a další.** Effect of fuel properties on biomass combustion. Part II. Modelling approach—identification of the controlling factors. *Fuel.* 2005, Sv. 84, 16, stránky 2116–2130.
- [5] *A 2-D mathematical model of on-grate municipal solid waste combustion.* **Ashtana, Abishek, a další.** San Diego : TMS (The Minerals, Metals & Materials Society), 2006. Advanced Processing of Metals and Materials Volume 1: Thermo and Physicochemical Principles: Non-Ferrous High-Temperature Processing. Sv. 1, stránky 465-474. ISBN 978-0-87339-634-9.
- [6] **Zhou, H., a další.** Numerical modeling of straw combustion in a fixed bed. *Fuel.* 2004, ISSN 00162361, stránky 389-403.
- [7] **Juřena, Tomáš.** *Numerical modelling of grate combustion: Numerické modelování spalování na roštu.* Brno : Vysoké učení technické v Brně. Fakulta strojního inženýrství, 2012. ISBN 978-80-214-4649-6.
- [8] **Ryu, C., Shin, D. a Choi, S.** Combined simulation of combustion and gas flow in a grate-type incinerator. *Journal of the Air & Waste Management Association.* 2002, Sv. 52, 2, stránky 189-197.
- [9] **Krugel-Emden, Harald a Kačianauskas, Rimantas.** Discrete element analysis of experiments on mixing and bulk transport of wood pellets on a forward acting grate in discontinuous operation. 2012, Sv. 92, stránky 105-117.
- [10] **Ku, Xiaoke, Li, Tian a Løvås, Terese.** Eulerian–Lagrangian Simulation of Biomass Gasification Behavior in a High-Temperature Entrained-Flow Reactor. *Energy Fuels.* 2014, Sv. 28, str. 5184–5196.
- [11] **Mohseni, Mohammad, Kolomijschuk, Alex, Peters, Bernhard, Demoulling, Marc.** Biomass drying in a vibrating fluidized bed dryer with a Lagrangian-Eulerian approach. *International Journal of Thermal Sciences.* 2019, Sv. 138, stránky 219-234.
- [12] **Peters, Bernhard.** Validation of a numerical approach to model pyrolysis of biomass and assessment of kinetic data. *Fuel.* 2011, Sv. 90, 6, stránky 2301-2314.
- [13] **Yang, Y.B., Goh, Y.R., Zakaria, R., Nasserzadeh, V., Swithenbank, J.** Mathematical modelling of MSW incineration on a travelling bed. *Waste Management.* 2002, Sv. 22, 4, stránky 369-380.
- [14] **Ryu, C., a další.** Thermal reaction modeling of a large municipal solid waste incinerator. *Combustion Science and Technology.* 2004, Sv. 176, 11, stránky 1891-1907.
- [15] **Bellais, Michel.** *Modelling of the pyrolysis of large wood particles.* Stockholm : autor neznámý, 2007. Doctoral Thesis. ISBN 978-91-7178-709-5.

- [16] **Peters, Bernhard a Bruch, Christian.** Drying and pyrolysis of wood particles: experiments and simulation. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*. 2003, Sv. 70, 2, stránky 233-250.
- [17] **Wurzenberger, Johann C., Wallner, Susanne a Raupenstrauch, Harald.** Thermal conversion of biomass: Comprehensive reactor and particle modeling. *AIChE Journal*. 2002, Sv. 48, 10, stránky 2398-2411.
- [18] **R.P. van der Lans, L.T. Pedersen, A. Jensen, P. Glarborg, K. Dam-Johansen.** Modelling and experiments of straw combustion in a grate furnace. *Biomass and Bioenerg.* 2000, 19, stránky 199-208.
- [19] **Collazo, J., a další.** Numerical modeling of the combustion of densified wood under fixed-bed conditions. *Fuel*. 2012, Sv. 93, stránky 149-159.
- [20] **Hermansson, Sven a Thunman, Henrik.** CFD modelling of bed shrinkage and channelling in fixed-bed combustion. *Combustion and Flame*. 2011, Sv. 158, 5, stránky 988-999.
- [21] **Gómez, M.A., a další.** CFD modelling of thermal conversion and packed bed compaction in biomass combustion. *Fuel*. 2013, Sv. 117, stránky 716-732.
- [22] **Gu, Tianbao, a další.** Municipal solid waste incineration in a packed bed: A comprehensive modeling study with experimental validation. *Applied Energy*. 2019, stránky 127-139.
- [23] **Kubisz, Pavel.** *Návrh experimentálního reaktoru pro výzkum spalování biomasy v pevném loži.* Brno : Vysoké učení technické v Brně. Fakulta strojního inženýrství, 2010. str. 58. Diplomová práce. Vedoucí práce Ing. VÍT KERMES, Ph.D..
- [24] **ANSYS® Academic Research.** *ANSYS FLUENT 19.1. User Guide*. 2018.
- [25] **Xu, Junzeng, a další.** Error of Saturation Vapor Pressure Calculated by Different Formulas and Its Effect on Calculation of Reference Evapotranspiration in High Latitude Cold Region. *Procedia engineering*. 2012, Sv. 28, stránky 43 – 48.
- [26] **Gómez, M.A., a další.** CFD simulation of a solar radiation absorber. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2013, ISSN 00179310.
- [27] **Patankar, Suhas V.** *Numerical heat transfer and fluid flow*. Bristol : Taylor & Francis, 1941. str. 197. ISBN 0-89116-522-3.
- [28] **ANSYS® Academic Research.** *ANSYS FLUENT 19.1. Customization Manual*. 2018.

## Seznam použitých symbolů a zkratk

Symbol	Veličina	Jednotka
$H_{bed}$	počáteční výška palivového lože	$m$
$I_b$	intenzita záření černého tělesa	$W \cdot m^{-2} \cdot sr^{-1}$
$S^{comp}$	kompensační zdrojový člen	dle použití
$V_R$	viskózní odpor	$m^{-2}$
$d_{in}$	vnitřní průměr částic	$m$
$d_{out}$	vnější průměr částic	$m$
$p_{abs}$	absolutní tlak	$Pa$
$p_{rel}$	relativní tlak	$Pa$
$\vec{r}$	polohový vektor	$m$
$\vec{s}$	směrový vektor	$m$
$\vec{u}$	rychlost	$m \cdot s^{-1}$
$\rho_b$	objemová hmotnost	$kg \cdot m^{-3}$
$\sigma^{sc}$	rozptylový koeficient	$m^{-1}$
$h$	měrná entalpie	$J \cdot kg^{-1}$
$\Gamma$	difuzní koeficient	jednotka
$A$	Plošný obsah	$m^2$
$Ab$	absorptance	1
$I$	Intenzita záření	$W \cdot m^{-2} \cdot sr^{-1}$
$E$	energie	$J$
$C$	koncentrace	$kg \cdot m^{-3}$
$C^{sat}$	koncentrace nasycených par	$kg \cdot m^{-3}$
$IN_r$	setrvačný odpor	$m^{-2}$
$Nu$	Nusseltovo číslo	1
$Pr$	Prandtlovo číslo	1
$Re$	Reynoldsovo číslo	1
$p^{sat}$	tlak nasycených par	$Pa$
$T$	termodynamická teplota	$K$
$V$	objem	$m^3$
$V_m$	molární objem	$m^3/kmol$
$p$	tlak	$Pa$
$t$	čas	$s$
$\alpha$	absorpční koeficient	$m^{-1}$
$\gamma$	porozita lože	1
$\gamma_p$	porozita částic paliva	1

$k_d$	koeficient přenosu hmoty	$m \cdot s^{-1}$
$\mu$	dynamická viskozita	$kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$
$\rho$	hustota	$a \cdot b^1 \cdot K^{-1}$
$\sigma$	Steffan–Boltzmannova konstanta	$W \cdot m^{-2} \cdot K^{-4}$
$R$	Univerzální plynová konstanta	$J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}$
$\phi$	obecná skalární veličina	jednotka
$n$	index lomu	1
$\lambda$	tepelná vodivost	$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$
$I_e$	intenzita záření	$W \cdot m^{-2}$
$\Phi$	rozptylová funkce	1
$l_p$	hloubka průniku záření	$m$
$\epsilon$	emisivita	1
$R_i$	rychlost i-té reakce	$kg \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$
$T_e$	střední teplota	$K$
$k$	rychlostní konstanta	$s^{-1}$
$r_c$	poměr CO/CO <sub>2</sub>	1
$\theta$	stechiometrický poměr CO/CO <sub>2</sub>	1
$p_{bi}$	parciální tlak i-té složky plynné směsi	$Pa$
$\Omega$	prostorový úhel	$sr$
$\sigma^{sc}$	rozptylový součinitel	$m^{-1}$
$\alpha$	absorpční součinitel	$m^{-1}$
$\vec{r}$	polohový vektor	$m$
$\vec{s}$	směrový vektor	1

Index	Význam
$g$	plynná složka/produkt/fáze
$l$	kapalná složka/produkt/fáze
$s$	tuhá složka/produkt/fáze
$pal$	palivo
$straw$	sláma
$moist$	vlhkost
$vol$	prchavá hořlavina
$ash$	popelovina
$char$	tuhá hořlavina

## Seznam použitých obrázků a tabulek

Obr. 1.1 – Schéma realizace procesu kolapsu lože [22] .....	16
Obr. 2.1 – Zobrazení uvažované spalovací komory [20] .....	20
Obr. 2.2 – Rozdělení objemu na jednotlivé zóny a označení hlavních rozměrů .....	21
Obr. 3.1 – Způsoby sdílení hmoty mezi palivem a plynnou směsí .....	30
Obr. 3.2 – Schéma přenosu a zdrojů energie v palivovém loži.....	33
Obr. 3.3 – Zobrazení úhlů a pixelizace pro DOM model [26] .....	35
Obr. 3.4 – Označení částí objemu porézní zóny .....	37
Obr. 3.5 – Algoritmus pro Pressure-Based Segregated Solver [26].....	38
Obr. 3.6 – Postup inicializace hmoty paliva.....	39
Obr. 3.7 – Aktualizace porozity a souvisejících veličin.....	42
Obr. 3.8 – Obsah listu BOUNDING_BOX.....	43
Obr. 3.9 – Počáteční stav teploty tuhé fáze ( $t = 0$ s).....	43
Obr. 3.10 - Teplota záření ( $t = 25$ s).....	44
Obr. 3.11 – Teplotní pole tuhé fáze ( $t = 25$ s).....	44
Obr. 3.12 – Hmotnostní zlomek vodní páry ( $t = 25$ s).....	45
Obr. 3.13 - Teplota plynu v blízkosti stěn při stacionárním a nestacionárním výpočtu .....	47
Obr. 3.14 - Časový vývoj rozložení objemové hmotnosti vlhkosti $\rho_{B,moist}$ .....	47
Obr. 3.15 - Porovnání fronty sušení a rozložení teplot paliva.....	48
Obr. 3.16 - Profil teploty plynu (vpravo a hmotnostního zlomku vodní páry.....	49
Obr. 3.17 - Časový vývoj teplotního profilu paliva v ose spalovací komory.....	49
Obr. 3.18 - Relativní tlak napříč ložem a označení vektorů rychlosti v podroštové části. ....	50

---

Tab. 1.1 – Rozsahy % hm. pro hrubý rozbor biomasy [4] .....	13
Tab. 2.1 – Hrubý a prvkový rozbor testovacího paliva [6] .....	23
Tab. 2.2 – Složení produktů pyrolýzy [6] .....	23
Tab. 2.3 – Známé vlastnosti komponent paliva.....	24
Tab. 2.4 – Vlastnosti spalované slámy .....	24
Tab. 2.5 – Stechiometrické koeficienty reakce spalování sloučeniny $C_xH_yO_z$ .....	25
Tab. 2.6 - Hodnoty výhřevností, resp. výparného tepla.....	26
Tab. 2.7 - Počáteční hmotnost a celková entalpie paliva, resp. složek paliva .....	27
Tab. 2.8 - Množství uvolněných plynných produktů při dokonalém spálení paliva.....	27
Tab. 2.9 - Stechiometrická množství suchého spalovacího vzduchu .....	27
Tab. 2.10 – Hodnoty průtoků primárního vzduchu [23] .....	27
Tab. 2.11 – Okrajové podmínky pro vstup primárního vzduchu.....	28
Tab. 2.12 – Parametry porézní přepážky .....	28
Tab. 3.1 – Definice členů bilanční kontroly.....	41
Tab. 3.2 –hodnoty pro zkušební případ 2D kanálu.....	42



## **Seznam příloh**

- knihovna UDF pro ANSYS Fluent
- inicializační tabulka složení a rozložení hmoty paliva
- .cas soubor obsahující model reaktoru